

NEWSLETTER Q4/2020

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM

Nový nejvýkonnější český superpočítač se bude jmenovat Karolina

05

Nové datové úložiště pro uživatele IT4Innovations

V lednu jsme dokončili instalaci nového uživatelského datového úložiště, které poprvé nebude součástí výpočetního clusteru jako tomu bylo v minulosti u Anselmu, Salomonu a Barbory.

07

IT4Innovations zprovoznilo Laboratoř vizualizace a virtuální reality

Nové u nás naleznete i Laboratoř vizualizace a virtuální reality. Ta bude využívána k vizualizaci 3D obsahu a bude sloužit k podpoře vlastního výzkumu realizovaného v IT4Innovations a VŠB-TUO.

09

1. etapa projektu simulátor pro detekci překážek na železnici dokončena

Přečtete si, co je nového v projektu, jež jsme zahájili ve spolupráci s firmou IXPERTA již před rokem a jehož cílem je vyvinout funkční vzorek drážního vozidla detekujícího překážky v jízdním profilu.

11

Návrh materiálů – blíže realitě prostřednictvím exascalových výpočtů

V tomto Newsletteru bychom vás rádi seznámili s třetí výzkumnou vlajkovou lodí národního superpočítačového centra IT4Innovations, která se zabývá návrhem materiálů s pomocí superpočítačů.

13

Vyhodnocení 20. Veřejné grantové soutěže

Více než 78,5 milionů jadrohodin výpočetních zdrojů IT4Innovations bylo rozděleno mezi 70 úspěšných projektů. Rádi bychom vám představili vybrané projekty, jež získaly nabízený výpočetní čas.

17

Výzkum s přispěním superpočítačů IT4Innovations získal cenu Česká hlava

Jiří Dědeček spolu s Edytou Tabor a Štěpánem Sklenákem z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR využili naše superpočítače a našli unikátní cestu, jak přeměnit metan na metanol.

21

Díky projektu LEXIS jsou HPC technologie na dosah malým a středním podnikům, průmyslu i společnosti

Nová platforma pomůže průmyslu, společnosti a zejména malým a středním podnikům, aby získaly snadný a bezpečný přístup k superpočítačům a mohly je využívat bez nutnosti pokročilých znalostí v oblasti výpočetní techniky.

23

Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí

Projekt ES4G si dal za cíl vyvinout nové systémové řešení řízení toku energie v energetické platformě komplexního systému Sophisticated Energy System na úrovni distribučních sítí obcí, měst či mikroregionů.

25

IT4Innovations zapojeno do prestižního projektu EVEREST

Zahájili jsme spolupráci na mezinárodním projektu EVEREST. Ten vyvíjí celostní přístup navrhování výpočtů a komunikace ve špičkovém především bezpečném systému pro vysoce výkonné datové analýzy.

27

Proběhlo u nás nebo s námi

Současná situace je stále ovlivněna pandemií Covid-19, což vede k tomu, že řada akcí je zrušena anebo jsou organizovány virtuálně. IT4Innovations jde s dobou a své akce proto organizuje online formou.

29

KRÁTCE



VÍT VONDRÁK PATŘÍ MEZI TOP IT OSOBNOSTI ROKU 2020

Magazín Computerworld vyhláší každoročně anketu TOP IT osobností roku. Jako vždy se jedná o mix inovátorů, zakladatelů start-upových firem či zkušených lidí, kteří se v IT pohybují delší dobu. Jednou z TOP 30 IT osobností roku 2020 se stal také ředitel IT4Innovations, Vít Vondrák.



Medailonek Víta Vondráka

OSTRAVSKÁ UNIVERZITA SOUČÁSTÍ DOKTORSKÉ ŠKOLY

Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC (MathInHPC) byla založena Matematicko-fyzikální fakultou UK, Matematickým ústavem AV ČR, Fakultou elektrotechniky a informatiky VŠB – TUO a IT4Innovations v roce 2019. Nově se partnerem stala i Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity s doktorským studijním programem Biofyzika a fyzika nanostruktur.



www.mathinhpc.cz

KRÁTCE

VYUŽIJTE KURZY PRACE KDEKOLIV V EVROPĚ

Současná situace nepřeje klasickým kurzům, nicméně nabízí možnosti zúčastnit se mnoha kurzů online. Využijte široké nabídky kurzů kdekoliv v Evropě v rámci PRACE. Kurzy určené akademickým pracovníkům jsou zcela zdarma.

PRACE Online Training



training.prace-ri.eu

PROJEKT LEXIS VYDAL PRVNÍ NEWSLETTER

Pro všechny příznivce HPC, cloudu a velkých dat vydal projekt LEXIS svůj první newsletter, který přináší více informací o projektu, jeho plánovaných aktivitách a shrnuje úspěchy projektu v uplynulých měsících.

lexis-project.eu/web

SBORNÍK HPCSE KE STAŽENÍ

K dispozici je sborník příspěvků z konference HPCSE 2019, který vydal Springer.

[Stažení ZDE](#)

PROJEKT SCTRAIN ZVÝŠÍ POVĚDOMÍ O HPC

IT4Innovations je součástí projektu SCtrain, jehož posláním je metodický přístup k doplnění mezer v současných vysokoškolských kurzech a zvýšení povědomí o HPC pro budoucí odborníky v oblasti vědy, techniky, inženýrství a matematiky. Vedle IT4Innovations na projektu spolupracují i Fakulta strojního inženýrství Univerzity v Lublani, rakouské superpočítačové centrum Vienna Scientific Cluster a italské superpočítačové centrum CINECA.

SCtrain | SUPERCOMPUTING
KNOWLEDGE
PARTNERSHIP

sctrain.eu

BUDE TO KAROLINA



Nový nejvýkonnější český superpočítač se bude jmenovat Karolina

V posledním čtvrtletí minulého roku proběhla soutěž o jméno nejvýkonnějšího superpočítače v ČR, který bude letos instalován v IT4Innovations. Z více než 5 tisíc návrhů, jež zaslalo přes 2 tisíce osob, bylo porotou vybráno jméno KAROLINA.

Veřejná soutěž o jméno nového superpočítače byla vyhlášena v říjnu minulého roku. Celkem se během dvou měsíců sešlo 5 114 návrhů, které zaslalo přes 2 tisíce hlasujících. Z došlých návrhů byly vybrány 3 výherci, jež získají hodnotné ceny od společnosti Hewlett Packard Enterprise, která je dodavatelem superpočítače Karolina. Mezi nejčastěji nominovanými jmény se objevovala jména mýtických či fiktivních osob (Golem, Bivoj, Cimrman, Perun či Sheldon), známých vědců a myslitelů (Amos, Albert) nebo míst a bývalých dolů v Moravskoslezském kraji (Ema, Landek, Odra, Karolina). Před desetičlennou porotou tak stál nelehký

úkol vybrat jméno, jež bude originální, výstižné, jednoslovné, dobře znějící v českém i v anglickém jazyce, složené ze čtyř až osmi písmen, které nebude obsahovat speciální znaky či diakritiku.

„V minulosti byla vždy vybrána jména vztažující se k moravskoslezskému regionu a já osobně jsem rád, že je tradice v případě Karoliny dodržena,“ uvádí Vít Vondrák, ředitel IT4Innovations. *„Věřím, že superpočítač Karolina, který má našlápnuto na umístění v padesátce nejvýkonnějších superpočítačů světa, si vybuduje skvělé renomé, neb bude přístupný nejen českým, ale také evropským vědeckým a průmyslovým uživatelům,“* dodává Vondrák.

Pořízení EuroHPC superpočítače Karolina je financováno z projektu OP VVV s názvem „IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale“, registrační číslo projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001791. Pořízení a provozování EuroHPC superpočítače Karolina je společně financováno Evropským společným podnikem pro vysoce výkonnou výpočetní techniku, prostřednictvím Nástroje Evropské unie pro propojení Evropy a výzkumného a inovačního programu Horizon 2020, jakož i Českou republikou.



SUPERPOČÍTAČ KAROLINA

Superpočítač Karolina bude dosahovat špičkového výkonu 15,2 PFlop/s. Instalace tohoto unikátního výpočetního systému již probíhá a zprovoznění bude v první polovině roku 2021. Jeho služba vědě, průmyslu i společnosti se plánuje až do roku 2025.

Více informací a fotogalerii z instalace naleznete [ZDE](#)

PROČ KAROLINA?

Je již tradicí, že jména pro ostravské superpočítače, které jsou provozovány v IT4Innovations národním superpočítačovém centru vybírá veřejnost. Bylo tomu tak v případě Anselmu, Salomonu i Barbory.

Jméno Karolina odkazuje k dalšímu z dolů v Ostravsko-karvinském revíru, který Salomon Rothschild pojmenoval po své manželce Caroline. Ostatně koksovnu Karolina stojící v samém centru Ostravy až do 80. let si ještě Ostravané živě vybavují a s Ostravou neodmyslitelně spojují.



ÚLOŽIŠTĚ PROJECT



Nové datové úložiště pro uživatele IT4Innovations

IT4Innovations v lednu dokončilo instalaci nového uživatelského datového úložiště, které poprvé nebude součástí výpočetního clusteru jako tomu bylo v minulosti u Anselmu, Salomonu a Barbory. K pořízení samostatného datového úložiště přistoupilo IT4Innovations s ohledem na odlišnou životnost a délku podpory jednotlivých technologií, kdy právě datová úložiště typicky svou životností překonávají výpočetní technologie.

Data uživatelů na výpočetních clusterech mají s ohledem na své určení různou délku života, a proto jsou často s clusterem pořizována různá datová úložiště. Typicky se pro účely existence uživatelských účtů pořizují méně výkonná a málo kapacitní řešení (tzv. domácí adresáře – HOME storage), pro samotné vykonávání výpočtů naopak vysoce výkonná a středně velké řešení (tzv. SCRATCH storage) a v neposlední řadě pro dlouhodobé ukládání dat přesahující životní cyklus jednotlivých ročních projektů se pořizují co největší, ovšem stále rozumně výkonná řešení. A to je právě případ nového datové úložiště pracovně označovaného jako tzv. PROJECT storage. „*Projekty IT4Innovations často kombinují využití více*

výpočetních technologií, a proto dává smysl nové úložiště pořídít mimo rámec konkrétního clusteru a naopak zajistit jeho plnou dostupnost stejným způsobem ve všech existujících i budoucích systémech. Nese to s sebou sice nevýhodu v nemožnosti nativní integrace do vysokorychlostní výpočetní sítě, (na rozdíl od SCRATCH), ale přináší to výhodu oné univerzální a unifikované použitelnosti pro uživatele,“ uvádí Filip Staněk, senior HPC architekt IT4Innovations.

Samotné datové úložiště je navrženo modulárně tak, aby do budoucna umožňovalo bezvýpadkově rozšiřování kapacity, a tím zajistilo uživatelům možnost nepřetržitého využití. Z technického hlediska je klíčovou vlastností vysoká dostupnost, kterou zajišťují redundantní prvky od cest samotných disků k jejich řadičům, serverům a clusterům, použití RAID technologií a clusterové řešení provozu serverů poskytující data.

Uživatelé s novým úložištěm dostanou možnost dostatečně dimenzovaného prostoru pro svá data jak kapacitně, tak výkonnostně. Zvýší se dostupnost a zabezpečení jejich dat, kdy například

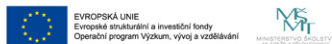
TECHNICKÉ ÚDAJE:

- Celková kapacita úložiště je 15 PB s celkovou propustností 39 GB/s a výkonem 57000 IO operací za vteřinu a je organizována do třech plně nezávislých bloků s ohledem na zmíněnou vysokou dostupnost a jednoduchou možnost replikace dat.
- IBM SpectrumScale umožňující pokročilé vlastnosti jako jsou snapshoty pro zajištění rychlé obnovy dat, která jsou omylem smazána uživateli či která jsou poškozena technickou závadou.
- Protokol NFS pro zajištění široké dostupnosti na všechny výpočetní celky IT4Innovations.
- Vysokorychlostní přenosy pomocí protokolu GridFTP.
- Do WAN sítě je celek připojen skrze dvojici výkonných síťových přepínačů Cisco s agregovanou přepínací kapacitou 14,4 Tb/s.

servisní zásahy či upgrade, ať již úložiště nebo výpočetního systému, nezpůsobí nedostupnost dat. Data budou mít k dispozici s unifikovaným přístupem ze všech výpočetních zdrojů, které využívají a s možností replikace kritických dat nad jednotlivými bloky. Celkově tedy dojde k navýšení kvality i komfortu práce s daty jednotlivých projektů.

Pořízení úložiště proběhlo v rámci projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale. Dodavatelem řešení se na základě otevřeného výběrového řízení stala firma DATERA, která se specializuje na návrhy a implementace datových úložišť a která např. dodala jedno z datových úložišť CESNET, jenž je spolu s IT4Innovations členem e-INFRA CZ.

Tento projekt byl podpořen Evropským fondem pro regionální rozvoj (ERDF) v rámci projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_01/3/0/001791) realizovaného v rámci OP VVV.



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



LABORATOŘ VIZUALIZACE A VIRTUÁLNÍ REALITY



IT4Innovations zprovoznilo Laboratoř vizualizace a virtuální reality

Na konci minulého roku byla v IT4Innovations zprovozněna Laboratoř vizualizace a virtuální reality (Laboratoř VaVR), která bude podpůrnou částí superpočítačové infrastruktury a bude využívána k vizualizaci 3D obsahu pomocí nejnovější dostupné technologie v oblasti velkoplošné 3D projekce a zařízení pro virtuální realitu. Laboratoř bude mimo jiné sloužit k podpoře vlastního výzkumu realizovaného v IT4Innovations a v rámci VŠB – Technické univerzity Ostrava.

Své využití nalezne laboratoř zejména při vizualizaci vědeckých výpočtů velkého rozsahu, jakými jsou projekty z oblasti inženýrství, nanotechnologií, materiálového designu a spousta jiných. Uplatní se ale také v rámci spolupráce s průmyslovými partnery, a to především k vizualizaci výsledků společného výzkumu, ověřování prototypů či prezentaci produktů. V neposlední řadě může pomoci také při vzdělávacích aktivitách jako je výuka anatomie ve 3D, předvádění výrobních postupů výrobků nebo jako obecné simulační tréninkové zařízení.

Popis vybavení laboratoře

Pevná 3D projekční stěna v promítacím sále je nasvícena špičkovým laserovým 3D projektorem firmy Barco s vysokým 4K rozlišením. Projektor je instalován za stěnou, takže uživatelé zkoumající prezentované výsledky se mohou pohybovat

v bezprostřední blízkosti projekčního plátna, aniž by na projekční plátno vrhali stín, jako by tomu bylo v případě přední projekce. Obraz promítaný projektorem je generován výpočetní stanicí přímo instalovanou v projekční místnosti nebo výpočetním klastrem v datovém sále IT4Innovations. K přenosu dat a obrazu přímo ze superpočítačů IT4Innovations je určena nově vybudovaná 100 Gb/s Ethernet linka mezi datovým sálem a VaVR laboratoří. Na tuto linku jsou také napojeny stanice generující obraz pro jednotlivé VR brýle.

Zázemí VR simulátoru je určeno pro spolupráci až 4 osob ve virtuální realitě. Je založeno na trojici bezdrátových brýlí HTC Vive Pro s 2K rozlišením pro každé oko. U těchto brýlí dochází k přenosu obrazu z renderovací stanice pomocí bezdrátové technologie a pohyb uživatele tak není omezen kabelem. Další důležitou součástí jsou VR brýle XTAL od české firmy VRgineers s vysokým rozlišením 4K pro každé oko. Ani v případě těchto brýlí nedochází k omezení pohybu kabelem, protože obraz je generován speciálním VR batohem (tedy počítačem na zádech). Renderovací stanice pro VR brýle jsou umístěny přímo v laboratoři a opět jsou připojeny rychlou 100 Gb/s Ethernet linkou k datovému sálu, takže je možné obraz přímo generovat na superpočítačích IT4Innovations.

LABORATOŘ VAVR JE ROZDĚLENA NA:

- promítací sál s hledištěm pro 16 diváků s 3D projekční stěnou ve 4K rozlišení se zadní projekcí a 5.1 prostorovým zvukem
- zázemí pro simulátor virtuální reality realizovaným pomocí čtyř bezdrátových VR brýlí

Oba celky mohou pracovat nezávisle na sobě, jelikož jsou instalovány v různých místnostech. Podporují tedy práci dvou nezávislých skupin, díky konektivitě na superpočítače.



PROJEKT SIMULÁTORU
PRO DETEKCI PŘEKÁŽEK NA ŽELEZNICI



1. etapa projektu simulátoru pro detekci překážek na železnici dokončena

V lednu loňského roku byl v IT4Innovations zahájen ve spolupráci s firmou IXPERTA s.r.o. projekt „Výzkum a vývoj funkčního vzorku železničního vozidla se schopností sběru dat a softwaru – simulátoru se schopností generování dat pro trénování detekce překážek v simulovaných podmínkách.“ Hlavním cílem projektu je vyvinout funkční vzorek drážního vozidla detekujícího překážky v jízdním profilu. Za tímto účelem bude použita soustava HW čidel, sofistikovaná architektura zpracování dat a nástroje umělé inteligence pro finální identifikaci překážek a jejich interpretaci. Jako důležitá podpora pro vývoj detekčního systému překážek je součástí projektu vytvoření softwarového simulátoru pro virtualizaci traťových podmínek a realizaci testovacích jízd v laboratorním prostředí. V takto vytvořeném prostředí bude možné vytvářet krizové situace, které analogicky mohou vznikat i na reálné trati. Také bude možné simulovat různé stavy počasí např. déšť, sníh, mlhu a ovlivnit tak generovaná výstupní data. V rámci řešení simulátoru budou specifikovány konkrétní důležité scénáře, jež mohou nastat a budou vybrány důležité parametry virtuálního prostředí, které bude možné ovlivnit, a to zejména za účelem vymezení komplexnosti simulátoru a současně zajištění požadované variability a věrohodnosti dat nezbytných pro trénování detekčního algoritmu.

Projekt, ve kterém je úkolem IT4Innovations vytvoření 3D virtuálního prostředí simulátoru a generování dostatečného množství kvalitních dat pro trénování detekčního algoritmu, má v současné době za sebou první fázi. Společnost IXPERTA navrhla konstrukci pro senzory, osadila testovací soupravu těmito senzory a zahájila sběr dat. Jako senzory, jež mají na trati ideálně umožnit detekci předmětů za všech okolností, byly použity vizuální kamera, termální kamera, laserové čidlo a senzor pro určení polohy vlaku. Analogie těchto senzorů budou použity také při vytváření softwarového simulátoru v IT4Innovations.

V současné době, na rozdíl od automobilové dopravy, na trhu neexistuje dostupný, obecně použitelný software, který by dokázal virtuálně napodobit vstupy pro učící se detekční systém na reálné železniční trati včetně klimatických a jiných omezujících podmínek. „*Pro tvorbu věrohodného virtuálního prostředí z oblasti železniční dopravy bylo nezbytné brát v úvahu velké množství dat jako je výškopis terénu, rastry vegetace, reálné profily rychlosti vlaku a různé typy statických či dynamických objektů. Vzhledem k výpočetní náročnosti generovaných dat je v rámci projektu využívána infrastruktura IT4Innovations,*“ uvádí Petr Strakoš, hlavní řešitel projektu v IT4Innovations.

V první etapě projektu byl modelován úsek trati mezi stanicemi Třebenice město – Dlažkovice. Došlo k vytvoření 3D scény, která obsahuje základní terén, objekty vegetace a křivku trati, jež slouží k modelování kolejí (objekty náspu, kolejí a pražců). Dle zadaného data a času byla vypočtena konkrétní fáze dne a nastavena pozice slunce a vzhled oblohy. Pro trať byly vytvořeny statické a dynamické objekty, které jsou následně umístěny do scény. Do takto vytvořeného prostředí byl dosazen objekt prototypu vlaku s kamerou a dalšími prvky nutnými pro simulaci čidel. Podle zadaných událostí byl spočítán pohyb/animace vlaku a dalších dynamických objektů. Ve vygenerovaném prostředí lze simulovat různé klimatické stavy a efekty počasí. Efekty jako mraky a sníh byly v první etapě projektu ve fázi experimentů.

Aktuální výstupy, které je schopen simulátor generovat jsou obraz z RGB kamery, hloubková mapa, LIDAR a segmentační mapa s rozdělením objektů podle jejich typu (ground truth). Hloubková mapa je získávána automaticky při použití metody

sledování paprsku a lze ji v budoucnu použít jako zdroj pro výpočet LIDAR dat, které jsou aktuálně získávány jiným způsobem. Ground truth záznam představuje důležitý výstup nezbytný pro trénování algoritmu detekce překážek, k čemuž dojde v další etapě projektu. Současně s těmito výstupy je v textové podobě generována také informace o poloze vlaku v GPS souřadnicích a informace o orientaci vlaku (azimut, elevace).

Ve druhé etapě projektu bude pokračovat implementace simulátoru. Důraz bude kladen na dosažení vyšší míry realističnosti syntetických dat pomocí modifikace augmentačními filtry na principu neuronových sítí. Bude také modelována trať mezi stanicemi Žďár nad Sázavou – Nedvědice s cílem dosažení maximální shody mezi modelem a reálným úsekem trati. Důležitou rolí v této etapě projektu bude hrát také ověřování zvolených konceptů použitých v simulátoru s reálným chováním. Může se jednat například o věrnost pohybu virtuálního vlaku a porovnání podobnosti vybraných úseků simulované tratě s reálnými úseky tratě atd.



Projekt Výzkum a vývoj funkčního vzorku železničního vozidla se schopností sběru dat a softwaru – simulátoru se schopností generování dat pro trénování detekce překážek v simulovaných podmínkách, číslo FWO1010274, je spolufinancován se státní podporou Technologické agentury ČR v rámci Programu TREND.

NÁVRH MATERIÁLŮ – BLÍŽE REALITĚ PRO- STŘEDNICTVÍM EXASCALOVÝCH VÝPOČTŮ

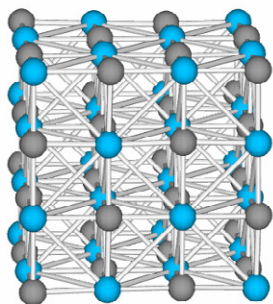


Návrh materiálů – blíže realitě prostřednictvím exascalových výpočtů

Třetí výzkumná vlajková loď IT4Innovations se zabývá rozsáhlými vícerozměrnými výpočty napříč různými prostorovými a časovými měřítky počínaje výpočty na kvantové úrovni (tzn. ab initio neboli výpočty z prvotních principů) přes atomistické výpočty a simulace klasické molekulární dynamiky po mikromagnetické výpočetní kalkulace, které se blíží úrovni metod konečných prvků. Hlavní výzkumná témata se týkají jevů souvisejících s vibracemi mřížky a magnetismem u 3D materiálů stejně tak jako heterostruktur a 2D materiálů. Seznamte se s hlavními výzkumnými směry této výzkumné vlajkové lodi.

Výzkumný směr: Vibrace mřížky a atomů – 3D a 2D materiály

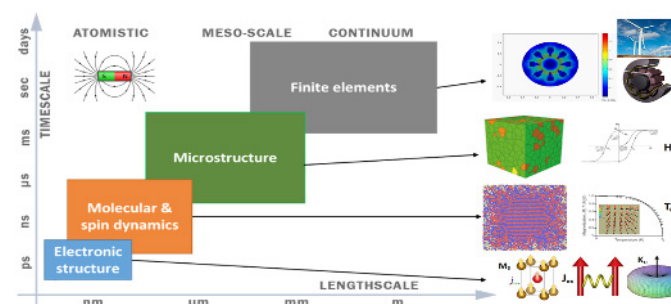
Pevné látky, molekuly a atomy vibrují i při teplotě $T=0$ K kolem svých rovnovážných pozic. Tyto kolektivní mřížkové excitace (fonony) jsou zodpovědné za mnoho zajímavých jevů jako teplotní roztažnost, supravodivost a jiné. Díky výpočetnímu výkonu superpočítačů IT4Innovations je



možné tyto jevy popsat na atomové úrovni a určit teplotní roztažnost a kapacitu jakéhokoliv materiálu přímo z kvantově-mechanických výpočtů bez použití experimentálních či jiných empirických parametrů. Výzkumný tým modeluje infračervené a ramanovská absorpční spektra a vzájemné interakce fononů, a tak je schopen porozumět přenosu tepla v materiálech a jeho vliv. Tyto výpočty umožňují navrhovat nová jaderná paliva, hledat ultratvrdé pevné látky podobné diamantu a také zlepšit účinnost (figure of merit) termoelektrických materiálů. Další oblastí, kterou se kolegové v rámci tohoto flagshipu zabývají, je studium interakce fononů s elektrony a fononů se spiny. To umožňuje studovat vznik supravodivosti a vůbec poprvé modelovat chování magnetických látek při konečných teplotách přímo pomocí kvantově-mechanických modelů, s cílem popsat chování magnetokalorik (chlazení pomocí magnetického pole) a porozumět ultrarychlé demagnetizaci pomocí laserového pulzu pro novou techniku ukládání dat.

Výzkumný směr: Výzkum/studium magnetismu

Tým vlajkové lodi dále zkoumá, modeluje a navrhuje magnetické materiály v různých prostorových a časových měřítkách pro několik technologických aplikací. Výzkum nachází uplatnění pro magnetické záznamy dat, spintroniku, elektromotory, elektrické generátory, magnetické aktuátory, biomedicínu (magnetická hypertermie), magnetické chlazení a jiné. Aplikuji a kombinují

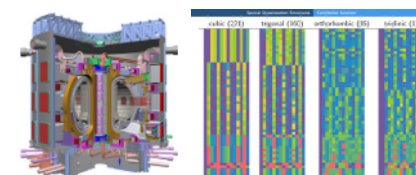
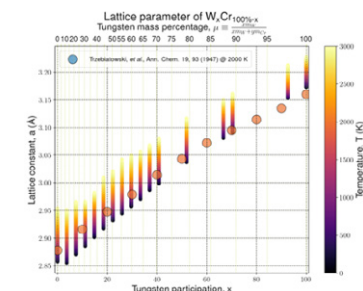


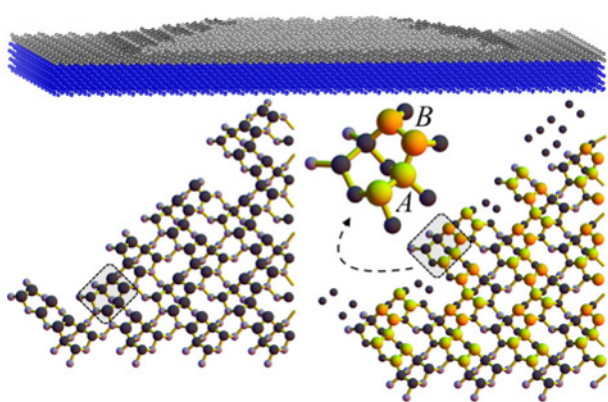
modelovací techniky k přesnému popsaní a pochopení magnetických materiálů. K těmto metodám patří teorie funkcionálu hustoty (Density Functional Theory, DFT) umožňující výpočty intrinsických magnetických vlastností v mikroskopickém měřítku a určení nových magnetických fází pomocí moderních evolučních algoritmů, atomová spinová dynamika (pro zohlednění účinků konečné teploty), molekulární dynamika (pro studium hranic zrn a krystalové stability), mikromagnetismus (pro výpočet magnetických domén, mikrostrukturálních efektů a hysteretických smyček v makroskopickém měřítku) a metoda konečných prvků k diskretizaci multifyzikálních modelů (pro simulaci výkonu magnetu za reálných provozních podmínek).

Výzkumný směr: Modelování vysoce entropických slitin tranzitivních kovů

V rámci výzkumu technologií výroby tzv. čisté energie jsou navrhovány nové slitiny použitelné pro termonukleární fúzní reaktor, jako je např. ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor). Jedná se o použití kvantově-mechanických modelů pro reálnou simulaci slitin

stěn reaktoru, které jsou vystaveny horké vodíkové plasmě o teplotě cca 200 000 000 °C, která je jinak v prostoru omezena pouze externím magnetickým polem (5T). Použité metody tak kombinací kvantové mechaniky, statistické fyziky a vysoce výkonné výpočetní techniky vytvářejí jakýsi synergický modelovací nástroj. Nedávno byly získány překvapivé vlastnosti u ekvatomárních slitin tvořených pěti prvky stabilizované entropickým členem při





vysokých teplotách s vlastnostmi značně odlišnými od vlastností jednoprvkových slitin. Začala éra nové kategorie slitin s vysokou (HEA), střední nebo nízkou entropií. I když jde hlavně o mechanické vlastnosti, nelze opomenout magnetické chování, které může ovlivnit stabilitu fáze nebo mechanické vlastnosti. Úplně první HEA se skládá z prvků Cr-Mn-Fe-Co-Ni, které se na RT chovají překvapivě paramagneticky. Cílem je tedy určit vliv složení a substitucí slitiny na její magnetické chování.

Výzkumný směr: Rozsáhlé atomistické simulace

Návrh a predikce fyzikálních vlastností reálných materiálů vyžaduje co nejpřesnější simulace velkého množství atomů, ze kterých je látka složena. Výpočty elektronové struktury, např. založené na DFT, se stávají hlavní výpočetní metodou v materiálovém výzkumu. Nicméně standardní výpočty DFT jsou prováděny jen pro systémy od jednotek do několika set atomů, a to jak z důvodů potřebného výpočetního času, tak i požadované paměti, neboť výpočetní náročnost roste s třetí, případně čtvrtou mocninou počtu atomů.

Pro reálnější systémy obsahující dislokace, rozhraní, hranice zrn, náhodné uspořádání slitin, nanočástice a biomolekuly, je potřeba provést simulace s řádově několika tisíci až několika milióny atomů. Kód CONQUEST, používající přístup matic hustoty s lokální bází, je velmi efektivní paralelní metodou, která škáluje lineárně s počtem atomů. Takové výpočty umožňují pochopit proces růstu nanočástic, kvantových teček, nano-drátů, krystalů atd.

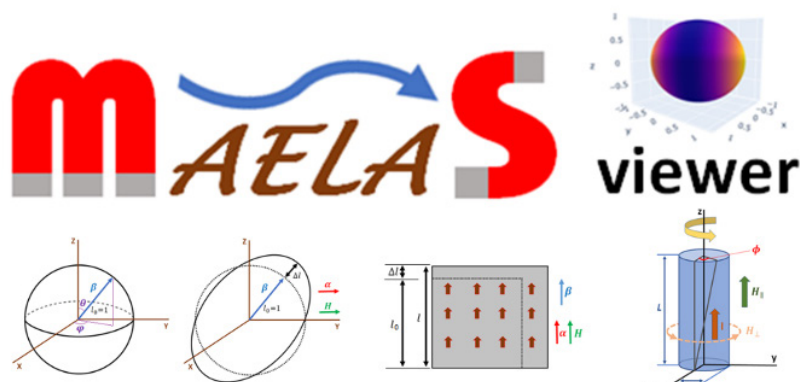
Dalším způsobem modelování rozsáhlých atomistických simulací je přístup molekulové dynamiky založený na interatomových potenciálech. Ten umožňuje pro mnohé aplikace určit chování fyzikálních vlastností při dané teplotě (difuze, teplota tání, koexistence několika fází). Zde by opět byly DFT výpočty neúměrně náročné, ne-li neuskutečnitelné s ohledem na sledování jevů v časové škále nanosekund, a to i s pomocí kódu CONQUEST. V rámci výzkumu je využíváno rovněž strojového a hlubokého učení k návrhu přesných interatomových potenciálů z DFT výpočtů.

>>

VÝZKUMNÝ SMĚR: VÝVOJ KÓDŮ

Členové výzkumného týmu vyvíjejí pro různá výzkumná témata řadu kódů psaných v jazycích Fortran, Python nebo Matlab/Octave. Níže je uveden výběr publikovaných a veřejně dostupných kódů.

- **PNADIS** Tento kód je automatickým analyzátozem Peierls-Nabarroových jader napětí a byl vytvořen v prostředí MATLAB. Tento kód provádí výpočet struktury jádra dislokace, Peierlsova napětí, napětového pole kolem jádra dislokace a zpevňování krystalu pomocí tuhého roztoku na základě Peierls-Nabarrova modelu a dalších modelů od něj odvozených.
- **MAELASviewer** Online aplikace pro vizualizaci a analýzu magnetostrikce prostřednictvím uživatelsky přívětivého interaktivního grafického rozhraní.



NÁVRH MATERIÁLŮ PRO PRŮMYSL: SPOLUPRÁCE SE SPOLEČNOSTÍ CONTINENTAL ČR

Pro navrhování mnoha technologických aplikací je třeba porozumět fyzikálním a chemickým procesům, které probíhají na makroskopické úrovni. Mnoho miniaturních elektronických zařízení je zabudováno do ochranných materiálů (křemík, polymery atd.), jež se mohou za určitých podmínek (plyn, kapalina) a podmínek (teplota, tlak) rozložit. Takové procesy je možno simulovat pro realistické modely (velké systémy čítající 10⁴–10⁶ atomů) pomocí klasické molekulární dynamiky (MD) s reaktivním silovým polem (ReaxFF). Tento interakční potenciál je kompromisem mezi přesností, kterou zajišťují DFT výpočty, velikostí systému a délkou vývoje systému v čase. Tyto simulace umožňují modelovat různá rozhraní mezi materiály a prostředím (rozhraní mezi plynou a pevnou nebo/a kapalnou a pevnou fází), strukturální stabilita za různých tlakových a teplotních podmínek, difuze různých molekul do materiálu a její vliv na jeho vlastnosti. Tyto poznatky mohou poskytnout rychlá technologická řešení pro průmysl (navrhování nových materiálů, ochranných vrstev a optimálních provozních podmínek), jaká byla v roce 2019 navržena pro společnost Continental ČR.

HLAVNÍ ŘEŠITEL

- Dominik Legut

VYHODNOCENÍ 20. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE



Vyhodnocení 20. veřejné grantové soutěže

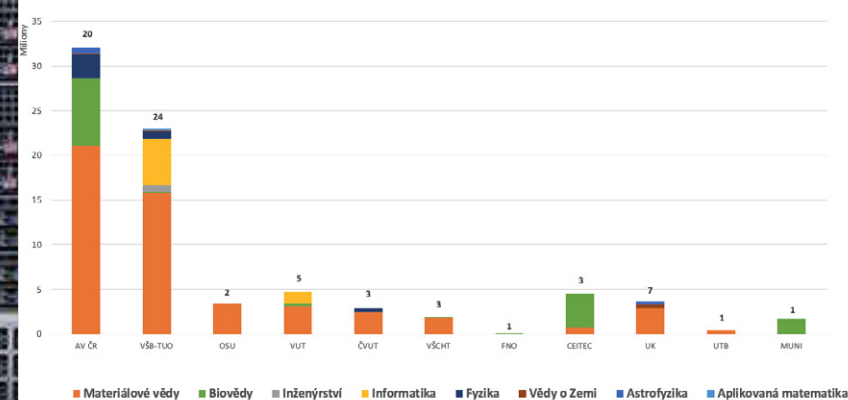
Uchazeči o výpočetní zdroje požádali v rámci 20. Veřejné grantové soutěže o téměř 148 milionů jádrohodin. Požadované zdroje převýšily vyhrazenou kapacitu 78,6 milionu jádrohodin o 88 %. S ohledem na vysoký zájem o výpočetní čas v poměru k nabízeným zdrojům, přistoupila alokační komise ke snížení alokací pro jednotlivé hodnocené projekty. Redukce se úměrně dotkly všech projektů. Alokační komise proto přerozdělila v tomto kole grantové soutěže více než 78,6 milionů jádrohodin mezi 70 úspěšných projektů, z toho je 25 víceletých projektů. Komise také rozhodla o alokacích pro další periodu víceletých projektů podaných v předchozích Veřejných grantových soutěžích.

Zaměstnancům ústavů Akademie věd ČR bylo přiděleno k vyřešení 20 projektů přes 32 milionů jádrohodin, což je více než 40 % celkového výpočetního času. Pro řešení 24 projektů získali zaměstnanci VŠB – Technické univerzity Ostrava více než 23 milionů jádrohodin, což je přibližně 30 % z celkových přerozdělených výpočetních zdrojů a třetí institucí s nejvyšším počtem jádrohodin bylo Vysoké učení technické v Brně. Jeho výzkumní pracovníci získali téměř 4,7 milionů jádrohodin, což činí 6 % celkového výpočetního času k vyřešení pěti projektů.

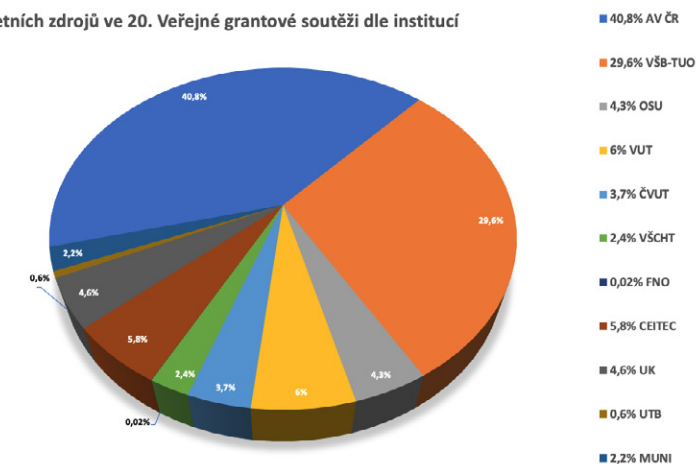
Alokace výpočetních zdrojů ve 20. Veřejné grantové soutěži dle vědních oborů a institucí

Alokace vyšší než 1 milion jádrohodin získalo 24 projektů, jejichž řešitelé jsou výzkumní pracovníci Akademie věd ČR, VŠB-TUO, Univerzity Karlovy, Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, Vysokého učení technického v Brně, Masarykovy univerzity, Českého vysokého učení technického v Praze, výzkumného centra CEITEC nebo Ostravské univerzity. Prvním třem nejúspěšnějším projektům bylo přiřazeno dohromady více než 16,6 milionů jádrohodin. Z toho více než 6 milionů jádrohodin našeho výpočetního času může využít Mojmír Sob z Akademie věd ČR pro svůj projekt „The entropy-driven segregation of impurities at grain boundaries“. Více než 5,3 milionů jádrohodin získal Pavel Hobza z Akademie věd ČR pro svůj projekt „In silico drug design“ a třetí nejvyšší alokaci obdržel Dominik Legut z IT4Innovations se svým projektem „Multiscale design of novel Rare Earth free permanent magnets“.

Alokace ve 20. Veřejné grantové soutěži dle vědních oborů



Alokace výpočetních zdrojů ve 20. Veřejné grantové soutěži dle institucí

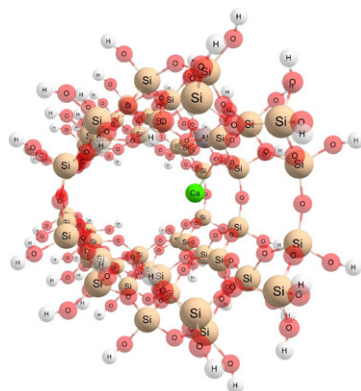


PŘEDSTAVUJEME VYBRANÉ PROJEKTY, KTERÉ ZÍSKALY VÝPOČETNÍ ZDROJE IT4INNOVATIONS VE 20. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽI:

doc. Ing. Václav Čuba, Ph.D.

České vysoké učení technické v Praze STUDIUM MATERIÁLŮ PERSPEKTIVNÍCH PRO VYUŽITÍ V HNOJIVECH S ŘÍZENÝM UVOLŇOVÁNÍM POMOCÍ MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKY

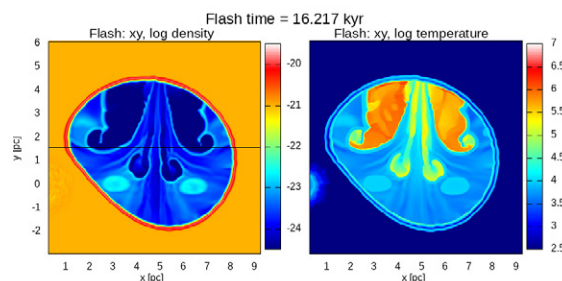
Zavedení tzv. „NPK (dusík, fosfor, draslík)“ a dalších více-složkových hnojiv usnadnilo zemědělcům péči o rostliny a půdu. Tato hnojiva zvýšila výtěžnost, nicméně způsobila také nové, především ekologické, problémy. K vyřešení ekologické zátěže, spojené hlavně s přebytkem dusíku v půdě a podzemních vodách, byla vyvinuta hnojiva s řízeným pomalým uvolňováním živin, kde rychlost uvolňování živin odpovídá rychlosti jejich příjmu rostlinou. Tento projekt hledá a studuje materiály, které jsou vhodné jako nosiče hnojiv, schopné řízeně uvolňovat živiny do prostředí. Takovým vhodným materiálem se zdají být zeolity, jejichž vlastnosti dovolují připravit hnojivo obsahující všechny potřebné živiny a zároveň umožňující jejich pomalé uvolňování. Vazby molekul živin se strukturami zeolitu jsou studovány metodami molekulárního modelování. Z výsledků modelování lze předpokládat, jak bude probíhat uvolňování živin a jaký bude rozdíl v silách vazeb mezi jednotlivými živinami a strukturou zeolitu. Cílem projektu je studovat možnosti přípravy pomalu působících hnojiv.



Barnabas Barna

Astronomický ústav Akademie věd ČR EXPANZE SUPERNOV V BLÍZKOSTI GALAKTICKÉHO CENTRA

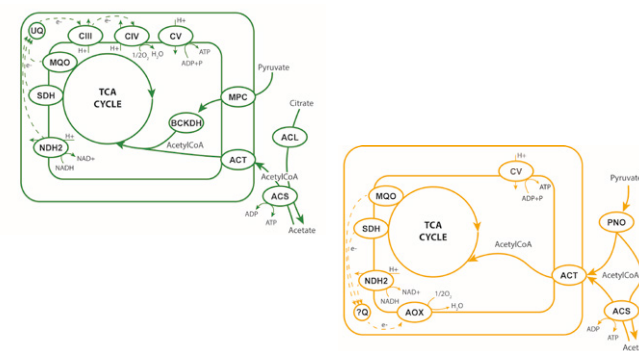
Výbuchy supernovy jsou jedny z nejenergetičtějších událostí ve vesmíru. Tato kataklyzmatická hvězdná úmrtí uvolňují chemicky obohacený materiál, který expanduje vysokou rychlostí do okolního prostoru. Výsledná bublina pak zametá okolní mezihvězdnou hmotu a vytvoří obálku o hmotnosti několika stovek sluncí. Tímto hraje důležitou roli v procesu tvorby hvězd, kdy expandující bubliny spouští vznik dalších hvězdných generací. Mezihvězdná hmota může být expandujícími obálkami dopravena do těsné blízkosti centrální obří černé díry, a tak zvýšit její aktivitu. Zda je tento scénář zodpovědný za projevy obří černé díry v Mléčné dráze však nelze potvrdit především díky nízké aktivitě této nejbližší obří černé díry. Simulace vývoje obálek a vliv počátečních a okrajových podmínek vyžaduje numerické metody. Barnabas Barna a jeho spolupracovníci plánují získané jádrohodiny využít na hydrodynamické simulace s kódem FLASH ve 3D. Cílem je prozkoumat interakci mezihvězdného prostředí s expandující obálkou. Výsledky budou porovnány s pozorováními: např. dnešní rozložení zbytků supernovy budou porovnávat se silnými rentgenovými záblesky v minulosti.



Mgr. Martin Kolisko, Ph.D.

Parazitologický ústav Akademie věd ČR GENOMICKÝ VÝZKUM ORGANELÁRNÍ EVOLUCE A ADAPTACE NA PROSTŘEDÍ U PARAZITŮ VÝTRUSOVČŮ

Výtrusovci (Apicomplexa) jsou skupinou vnitrobuněčných parazitů zvířat a patří mezi ně například původci závažného onemocnění člověka – malárie. Přestože o genomice a organelách zástupců výtrusovců je již mnoho známo, linie Gregarinida zůstává z tohoto hlediska neprobádaná, a to i přesto že se jedná o jednu z druhově nejbohatších skupin eukaryot. Cílem projektu je charakterizovat reprezentativní linie gregarin ze suchozemských a sladkovodních hostitelů. Gregariny nelze kultivovat, a proto použili metodu sekvenování transkriptomů a genomů jednotlivých buněk. Získaná data budou použita k fylogenomické analýze v kombinaci s nedávno publikovanými daty gregarin z mořských hostitelů. Tato analýza objasní evoluční pozici gregarin v rámci skupiny Apicomplexa, která byla v současnosti zpochybněna rozporuplnými výsledky dvou nedávno publikovaných studií. Robustní fylogeneze pak umožní studovat reduktivní evoluci organel ve skupině Apicomplexa a také genetické adaptace pro různé hostitele, hostitelská prostředí a vnitrobuněčný parazitismus u ostatních členů skupiny Apicomplexa.

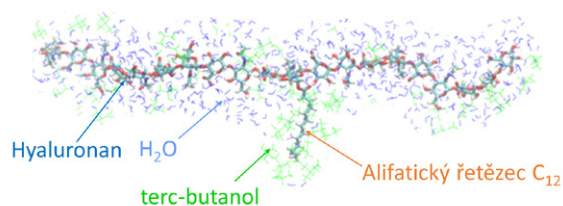


RNDr. Marek Ingr, Ph.D.

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně

SUBSTITUOVANÉ MOLEKULY HYALURONANU VE VODNÝCH A SMĚSNÝCH ROZPOUŠTĚDLECH

Kyselina hyaluronová (též hyaluronan, HA) je základní stavební složkou mezibuněčné hmoty kůže a pojivových tkání. Její kladný vliv na regeneraci tkání a hojení ran ji předurčuje k četným aplikacím ve farmacii a kosmetice. Jako biokompatibilní materiál je vhodná i ke konstrukci nosičů léčiv či tkáňových náhrad. Třebaže jde o látku silně hydrofilní, řada jejích aplikací vyžaduje použití nevodného prostředí. V návaznosti na předchozí studie volných makromolekul HA ve vodných roztocích a směsích vody a s ní mísitelné organické látky se nyní zabývá Dr. Marek Ingr a jeho řešitelský tým strukturou molekul HA substituovaných jedním nebo více alifatickými řetězci v týchž rozpouštědlech. Rovnovážné chování molekul je simulováno metodou molekulové dynamiky, z nichž je vyhodnocována konformace molekul a vzájemná poloha a interakce jejich částí, separace směsného rozpouštědla kolem jednotlivých částí molekuly, interakce částí molekul s molekulami v roztoku, zejména prekuzory následných substitučních reakcí. Výsledky těchto studií přispějí k optimalizaci reakcí vedoucích k tvorbě modifikovaných molekul HA a k návrhu materiálů na nich založených, jež mohou najít uplatnění ve zdravotnictví, kosmetice a řadě dalších oborů.

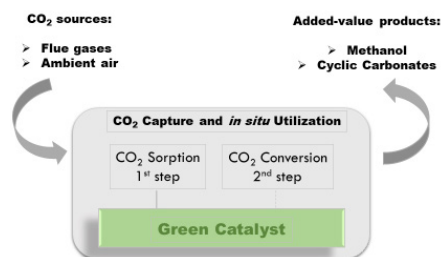


Dr. Valeria Butera

CEITEC, Vysoké učení technické v Brně

OBJEV NOVÝCH ÚČINNÝCH KATALYZÁTORŮ PRO ZACHYCOVÁNÍ CO₂

Oxid uhličitý (CO₂) je považován za hlavního viníka globálního oteplování. Více než polovina emisí CO₂ pochází z velkých průmyslových bodových zdrojů, zbytek pak má původ zejména v malých mobilních zdrojích. Snížení emisí pod kritickou úroveň vyžaduje nejen politické rozhodnutí, ale také nové vědecké přístupy k zachycování CO₂ a umožnění jeho přeměny z odpadního produktu na produkty s přidanou hodnotou. Klíčovými opatřeními k dosažení tohoto cíle budou realizovatelné efektivní procesy zaměřené na oddělování a využití CO₂ ze vzduchu ve velkém měřítku. Hlavním tématem tohoto projektu je vývoj inovativních technologií zaměřených na zpomalení nebo zamezení antropogenních emisí uhlíku. Výzvou pro ni je zejména návrh nových účinných, selektivních a „zelených“ homogenních a heterogenních katalyzátorů pro zachycování a přeměnu CO₂. Její výzkum se nejprve zaměří na materiály, které jsou vhodné pro oddělování a konverzi CO₂ přímo z okolního vzduchu (direct air capture – DAC), výsledky tohoto výzkumu pak následně připraví půdu pro vývoj vhodných technologií pro získávání CO₂ z velkých průmyslových zdrojů.

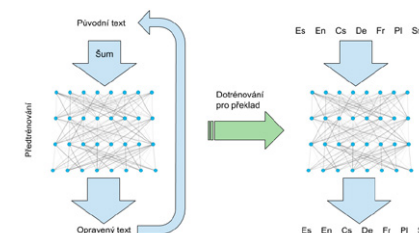


Ing. Josef Jon

Vysoké učení technické v Brně

VYSOCE VÍCEJAZYČNÝ NEURÁLNÍ STROJOVÝ PŘEKLAD VYUŽÍVÁJÍCÍ UČENÍ BEZ UČITELE

Strojový překlad lidského jazyka učinil velký pokrok v souvislosti s vývojem strojového učení. Texty přeložené neurálním strojovým překladem (NMT) jsou za určitých podmínek dokonce srovnatelné s překladem lidským. Podmínkou je, že pro daný jazykový pár je k dispozici velké množství paralelních, člověkem přeložených textů pro trénování modelu. Těch je však velmi málo. Zlepšení kvality NMT v ostatních jazycích je založeno na předtrénovaných modelech neuronových sítí pro reprezentaci jazyka. Ty umožňují využít velkých objemů textů nalezených na internetu, do nichž je však uměle přidán šum, kdy některá slova jsou vypuštěna, nebo nahrazena. Úkolem je zrekonstruovat původní text. Trénováním na této úloze se model vlastně mimochodem učí reprezentovat jazyk a porozumět mu, protože tyto schopnosti jsou nutné k tomu, aby text dokázal správně opravit. Předtrénované modely lze doladit ke koncovým úkolům pomocí výrazně menšího množství dat, než kdyby se trénovaly od začátku. Ukazuje se, že čím více je způsob přidávání šumu v předtrénovací fázi podobný koncovému úkolu, tím lepší je výsledek. Cílem inženýra Jona, který pro svůj projekt získal téměř 1,2 milionu jádroidin, je prozkoumat varianty šumových funkcí, jež jsou podobné překladu (např. nahrazení slova nebo fráze jeho překladem), a výsledné modely použít pro překlad v jazykových párech s malým množstvím trénovacích dat.



OCENĚNÍ ČESKÁ HLAVA



Výzkum s přispěním superpočítačů IT4Innovations získal cenu Česká hlava

Jiří Dědeček spolu s Edytou Tabor a Štěpánem Sklenákem z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR našli unikátní cestu, jak přeměnit metan na metanol, za což byli oceněni společností Česká hlava, cenou Invence. Při svém výzkumu využívali superpočítače IT4Innovations, na kterých výpočetně předpověděli výsledky, jež následně experimentálně potvrdili. Pro svůj výzkum získali 32 458 000 jádrohodin výpočetních zdrojů IT4Innovations v rámci šesti kol Veřejné grantové soutěže.

Zeolit je zjednodušeně dřevavý křemen a jeho jedinečnost spočívá v tom, že atomy křemíku a kyslíku vytvářejí propojenou strukturu kanálků a dutin, do kterých se vejdou menší molekuly. Když jsou v kanálech přítomná reakční centra, stávají se zeolity ideálním materiálem pro využití v katalýze.

Tým vědců z Oddělení struktury a dynamiky v katalýze Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského se v posledních letech intenzivně zabývá využitím zeolitů pro katalýzu redoxních reakcí. Jednou z nich je přeměna metanu na metanol. To je vzhledem k nízké reaktivitě metanu v současnosti jedna z největších výzev v oblasti heterogenní katalýzy a přitahuje obrovskou pozornost. Metan je hlavní složkou zemního plynu a je tedy levný a snadno dostupný. Bohužel, transport plynu a jeho skladování je o hodně komplikovanější než u ropy. Navíc ho dovedeme masově využívat jen jako palivo.

Využití metanu v chemické výrobě je dosud možné pouze nepřímými, energeticky, technologicky a ekonomicky velmi náročnými procesy. Konečná cena výsledného produktu, např. metanolu je pak většinou nepřijatelná. Metanol však nabízí velmi široké využití jako surovina pro chemickou výrobu, nebo alternativní palivo. Přímá oxidace metanu na metanol molekulárním kyslíkem představuje cestu, jak výrazně snížit náklady na výrobu metanolu a přibližuje nás tak k získání technologií pro výrobu levnějších paliv, ale i mnoha dalších průmyslově využitelných produktů.

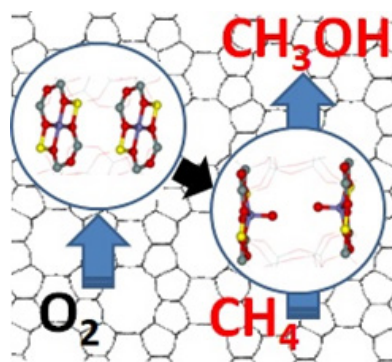


Schéma přímé oxidace metanu (CH_4) na metanol (CH_3OH) molekulárním kyslíkem (O_2) Obrázek: Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR

Donedávna neexistoval katalyzátor, který by přeměnil metan přímo na metanol molekulárním kyslíkem s uspokojivou efektivitou.



Tým Oddělení struktury a dynamiky v katalýze vytvořil a popsal strukturu a reaktivitu nových, unikátních typů reakčních center, která dovedou aktivovat kyslík dosud neznámým způsobem – rozštěpit ho. To dovedou dva kationty přechodového kovu (např. železa) naproti sobě, ale výrazně dále od sebe než v enzymech (ve vzdálenosti asi 7 desetimiliontin milimetru), a to již při pokojové teplotě. Tento unikátní systém se úspěšně povedlo využít pro vytvoření systémů pro oxidaci metanu na

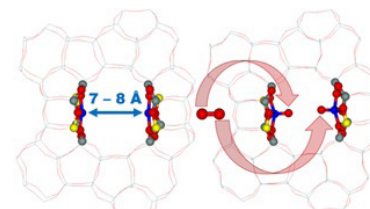


Schéma rozštěpení kyslíku za pokojové teploty Obrázek: Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR

metanol jako možného základu technologie pro využití metanu. Při výzkumu sehrály roli také superpočítače IT4Innovations, na kterých byly výsledky předpověděny a až následně experimentálně potvrzeny.

Kromě schopnosti rozštěpit molekulární kyslík a oxidovat metan na metanol i za laboratorní teploty vykazuje nová metoda další unikátní vlastnost. Metanol vzniklý oxidací metanu se již za laboratorní teploty rovněž spontánně uvolňuje do plynné fáze. Jedná se o velmi podstatnou výhodu proti ostatním katalyzátorům schopným selektivně oxidovat metan molekulárním kyslíkem, kde je navíc nezbytné k uvolnění metanolu aplikovat vodní páru. To pak vede k destrukci aktivních center a výsledně k jejich tak nízké aktivitě, že jsou v praxi nepoužitelné.

Více o výzkumu

VÝVOJ PROJEKTU LEXIS

The logo for LEXIS features the word "LEXIS" in a stylized, bold font. The letters "L", "E", and "X" are green, while "I", "S", and "I" are yellow. The "I" and "S" are connected, and the "I" has a small yellow triangle above it. The "S" has a small yellow triangle above it. The "I" and "S" are connected, and the "I" has a small yellow triangle above it. The "S" has a small yellow triangle above it.

Díky projektu LEXIS jsou HPC technologie na dosah malým a středním podnikům, průmyslu i společnosti

Nová platforma může pomoci průmyslu, společnosti a zejména malým a středním podnikům (MSP), aby měly snadný a bezpečný přístup k výkonným heterogenním distribuovaným infrastrukturám a mohly je využívat bez nutnosti pokročilých znalostí v oblasti výpočetní techniky. Aby se snížily vstupní bariéry do světa vysoce výkonného počítání, cloudových služeb a rozsáhlých dat, testuje projekt financovaný EU svou platformu v oblasti leteckého průmyslu, zemětřesení a tsunami a meteorologických a klimatických modelů.

Rostoucí množství dat představuje obrovskou výzvu pro organizace, které se snaží získat znalosti nezbytné pro podnikání, reálný provoz a výzkum. Kombinace technologií, jako jsou vysoce výkonné počítání (HPC), cloudové služby a velmi rozsáhlá data, je nezbytná k uspokojení potřeb velkých i malých podniků. To však bylo dosud obtížné, protože i ta největší superpočítačová centra na světě často sloužila pouze akademickému výzkumu, např. v oblasti fyziky.

„V rámci projektu LEXIS (Large-scale Execution for Industry & Society) vyvíjíme úspěšnou inženýrskou platformu na bázi kombinace vysoce výkonného počítání, cloudových služeb a velmi rozsáhlých dat, která využije geograficky distribuované výpočetní zdroje z existující evropské superpočítačové infrastruktury, uplatní analytická řešení pro práci s velkými daty a rozšíří je o cloudové služby“, vysvětluje hlavní koordinátor projektu Jan Martinovič z IT4Innovations. Vývoj platformy je poháněn jak třemi pilotními

případovými studiemi, tak i dalšími, které budou vybrány na základě veřejné výzvy.

Pilotní řešení v oblasti letectví se zaměřuje především na zrychlení workflows (výpočetních procesů) zaměřených na simulace turbínových zařízení a rotačních dílů pomocí optimalizací kódu. Kromě toho se pokročilé schopnosti simulace hydrodynamiky nyní používají také k predikci toku tekutin kolem složitých geometrií při turbulentním proudění v případě rotačních dílů.

Druhý pilot se zaměřuje na simulace a varování před zemětřesením a tsunami. Hlavním výsledkem byla jasná formalizace komplexních workflows, které probíhají za časově omezených podmínek. Byla zlepšena výpočetní efektivita simulačního kódu tsunami, což snížilo dobu výpočtu výsledku případného zaplavení vlnou tsunami na méně než minutu a tím následně umožnilo i rychlejší a přesnější nouzová varování.

V neposlední řadě se rozsáhlý pilotní projekt počasí a podnebí zabývá pokročilými workflows pro předpovídání např. bleskových povodní, zemědělských výnosů, lesních požárů a kvality ovzduší, a to vše na základě numerických předpovědí počasí. Modely byly zabaleny do kontejnerů a virtuálních strojů připravených ke spuštění a byly zavedeny účinné postupy pro zpracování údajů a zajištění kvality dat z různých zdrojů. Prototypy workflows jsou zaváděny a testovány na infrastruktuře LEXIS, která připravuje cestu pro následnou asimilaci vícenásobných dat o pozorovaném počasí, aby byly všechny jejich předpovědi spolehlivější.

Pro zajištění co nejlepší uživatelské zkušenosti byly společně s pilotními partnery shromážděny typické uživatelské scénáře, které poskytují neocenitelnou zpětnou vazbu. Na jejich základě se připravuje portál LEXIS, jenž bude sloužit jako jednotné kontaktní místo pro využívání platformy. V současné době existují prototypy zobrazení pro správu uživatelů v projektech, pro přístup k dostupným datovým souborům a jejich seznam, pro nasazování a běh aplikací a pro monitorování a vyúčtování.

„V projektu LEXIS byl zvolen přístup dle zásady „bezpečnost coby aspekt návrhu“, kdy bezpečnost představuje jeden z pilířů architektury tak zásadního významu, jako je řízení výpočtů a správa dat. Byl zaveden ucelený, chybově tolerantní a moderní aplikační rámec pro ověřování a autorizaci. Tento rámec poskytuje uživatelům systému LEXIS jednotné přihlašování a ověřování na základě rolí napříč celou komunitou poskytovatelů dat a služeb,“ upozorňuje Marc Levrier ze společnosti Atos. *„Kromě běžných cloudových a HPC zdrojů lze v rámci aplikačních workflows běžících na portálu LEXIS a přidělených orchestračním softwarovým programem v době běhu programu využívat také rozmanité akcelerační technologie (GPU, FPGA, Burst Buffers),“* dodává Marc Levrier.

Řešení, která přináší LEXIS, umožní lepší spolupráci mezi průmyslem a akademickou obcí. Nová platforma zajistí, aby malé a střední podniky a průmyslové společnosti byly schopny uživatelsky přívětivým způsobem využívat vhodné zdroje pro své aplikace.

„S cílem zlepšit kvalitu platformy LEXIS byla v prosinci vyhlášena otevřená výzva, v níž

byli partneři z akademické obce a podniků požádáni, aby své aplikace otestovali na platformě LEXIS a poskytli zpětnou vazbu. To by mělo také zvýšit dopad projektu a vytvořit zastoupení v různých dalších komunitách potenciálních uživatelů,“ dodává Martinovič.

Na základě pilotních projektů LEXIS bylo v řadě různých oblastí identifikováno několik následujících potřeb společných malým a středním podnikům a průmyslovým společnostem:

- dynamická orchestrace komplexních workflows řízená daty;
- sdílení dat mezi cloudovými a HPC zdroji a distribuovaná správa dat s příslušnou datovou podpůrnou vrstvou k orchestračním řešením;
- přístup k HPC/Big Data/cloudovým zdrojům pro malé a střední podniky a průmyslové společnosti včetně nových výpočetních a datových akceleratorů např. prostřednictvím GPU, FPGA a Burst Buffers
- snadná kontrola workflows a dat prostřednictvím uživatelsky přístupivého webového rozhraní s jednotným přihlášením k platformě prostřednictvím sdruženého AAI a souvislé integrace služeb vzdálené vizualizace.



Tento projekt získal finanční podporu z programu Evropské unie pro výzkum a inovace Horizont 2020 na základě grantové dohody č. 825532.

PROJEKT ES4G



Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí

V květnu loňského roku započal strategický projekt s názvem Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí (ES4G). Projekt ES4G spojuje unikátní řešitelské konsorcium – Centrum ENET a IT4Innovations při VŠB-TUO, VUT v Brně a aplikační garanty – E.ON Distribuce, a.s., ČEZ Distribuce, a.s. a ABB s.r.o. Ti vystupují v roli mentorů a směřují zaměření výzkumných aktivit projektu s ohledem na strategické směřování energetiky.

Projekt ES4G si dal za cíl vyvinout nové systémové řešení řízení toku energie v energetické platformě komplexního systému Sophisticated Energy System (SEN) na úrovni distribučních sítí obcí, měst či mikroregionů. SEN podpoří sofistikované metody řízení a perspektivní technologie za účelem zvýšení jeho bezpečnosti, spolehlivosti, surovinové nezávislosti, energetické soběstačnosti při maximálním zapojení decentrálních, zejména obnovitelných zdrojů energie. Cílem je zajistit připravenost na změnu koncepce řízení energetických soustav po implementaci zimního balíčku v souladu s Národním akčním plánem pro chytré sítě a aktualizovanou Státní energetickou koncepcí.

Role IT4Innovations v projektu ES4G

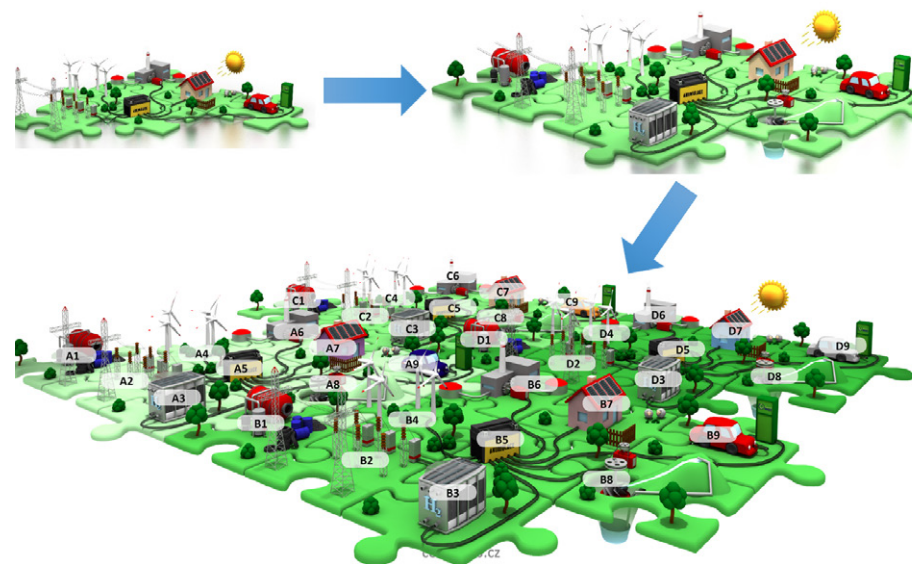
Pavel Praks, jenž se podílí na řešení projektu v rámci IT4Innovations, přibližuje spolupráci s Centrem ENET: „*Vyvíjíme model distribuční sítě elektřiny v ČR. Těžiště práce vědců z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace IT4Innovations*

spočívá v optimalizaci a verifikaci modelu elektrické sítě, včetně testování numerické spolehlivosti a robustnosti metod. Analýzy se soustředí i na modelování jednotlivých poruch a jejich kombinací s cílem popsat dopady těchto poruch na řádnou dodávku elektrické energie zákazníkům.“

Vzhledem ke kombinatorické explozi stavů je tato úloha tak výpočetně náročná, že řešení nelze jednoduše vyčíslit ani na superpočítači. Proto jsou pro optimalizace provozu elektrické sítě využity i biologicky inspirované algoritmy. K modelování se využívá programového balíku Pandapower a pro verifikaci jsou použity stochastické algoritmy, konkrétně genetické algoritmy, optimalizace rojem částic a metoda simulovaného žíhání. V IT4Innovations probíhá testování rychlosti, přesnosti a spolehlivosti těchto přístupů a průběžný postup prací i výsledky jsou konzultovány s partnery projektu, včetně aplikačních garantů.

Vývoj nových softwarů pro ES4G

IT4Innovations vyvíjí software pro identifikaci kritických komponent elektrické sítě. V modelu elektrické sítě jsou simulovány různé normální i abnormální provozní stavy a jsou sledovány dopady těchto stavů na prvky sítě i okolí. Cílem je identifikace kombinací komponent elektrické sítě, jejichž poruchy vedou k velkým změnám toku výkonu či k poruchám v síti. Získaná znalost kritických komponent bude využita i pro snadnější modelování poruchových



scénářů a pro získávání informací o „překážkách“ (bottlenecks) v sítích s cílem zvýšit robustnost sítě.

V IT4Innovations také probíhají práce na vývoji predikčního softwaru, jehož cílem je předpovědět spotřebu elektrické energie energetického systému z dat. Testován je nový software AI Feynman s využitím grafických karet Nvidia GPU a predikční metody založené na rozhodovacích strozech (např. XGBoost). IT4Innovations je

aktivní i ve vývoji a testování algoritmů pro kvalifikaci a kvantifikaci vlastností dynamických systémů, a tak přibližnou entropii, maximální Lyapunovův exponent a 0–1 test chaosu aplikuje na numerické simulace prováděné pomocí superpočítačů.



Projekt č. TK02030039 Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí je spolufinancován Technologickou agenturou ČR v rámci Programu na podporu aplikovaného výzkumu, experimentálního vývoje a inovací THETA.



PROJEKT EVEREST

IT4Innovations zapojeno do prestižního projektu EVEREST

Národní superpočítačové centrum IT4Innovations v říjnu oficiálně zahájilo spolupráci na mezinárodním projektu EVEREST. Česká republika spolupracuje na projektu s dalšími devíti partnery z pěti evropských států. Úlohy hlavní řešitelky za IT4Innovations zmíněného projektu, který je financován rámcovým programem Horizont 2020, se zhostí Kateřina Slaninová z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace.

Heterogenní distribuovaná povaha datových zdrojů v aplikacích vysoce výkonných datových analýz (HPDA) a s tím související výpočetní výkon jsou aspekty, které podněcují designéry navrhovat nové výpočetní systémy kombinující vysoce-výkonné počítání (HPC), cloudové služby a řešení v oblasti Internetu věcí s algoritmy umělé inteligence (AI). „Projekt EVEREST se zaměřuje na hledání shody mezi požadavky aplikace a vlastností daného hardwarového systému, protože pouze optimální shoda vede k efektivnímu výpočtu. Konkrétně se předpokládá, že budoucí systémy nejenže budou reflektovat požadavky založené na datech, ale také budou postaveny na komplexních architekturách, které musí být znovu navrženy a uzpůsobeny na míru dle povahy a místa původu dat a také dle typu učení či rozhodnutí, jež má být učiněno,“ objasňuje Kateřina Slaninová.

Projekt EVEREST si klade za cíl vyvinout holistický přístup navrhování výpočtů a komunikace v heterogenním, distribuovaném, škálovatelném a bezpečném systému pro vysoce výkonné datové analýzy. Tohoto cíle bude dosaženo zjednodušením

programovatelnosti heterogenních a distribuovaných architektur prostřednictvím přístupu řízeného daty, využitím hardwarově zrychlené umělé inteligence a prostřednictvím efektivního monitorování spouštění úloh pomocí unifikovaného konceptu spojujícího hardwarový a softwarový návrh. Projekt EVEREST předkládá návrh prostředí, které kombinuje aktuální programovací modely a nejnovější komunikační standardy s novými rozšířeními věnovanými konkrétní doméně.

Za účelem validace navrženého přístupu v rámci projektu EVEREST budou použity tři případové studie, zaměřené na konkrétní průmyslová odvětví: analytický predikční model počasí pro trh s obnovitelnými energetickými zdroji, aplikace pro monitorování kvality ovzduší průmyslových lokalit a framework pro modelování dopravy v reálném čase pro chytrý provoz v rámci konceptu Smart Cities. „Za zmíněnou třetí případovou studii, která modeluje dopravní provoz v reálném čase, bude zodpovědné IT4Innovations a společnost Sygic. Vedle toho však budeme zajišťovat také technickou část zabývající se dalším rozvojem programových modelů pro orchestraci komplexních workflows a problematikou využití výsledků vzniklých v rámci projektu,“ upřesnila Kateřina Slaninová. „Modelování dopravy na základě velkého objemu dat s využitím pokročilých AI technologií se nám jeví jako perspektivní cesta pro vývoj relevantních dopravních řešení pro města. Věříme, že tento projekt a spolupráce s IT4Innovations nám pomůže uvést taková řešení na trh,“ uvedl Radim Cmar, solution architect z firmy Sygic.

PROJEKT EVEREST



- 2019 – 2023
- financovaný programem Evropské unie Horizont 2020
- celkový rozpočet je 5 037 372,50 eur
- koordinátorem je IBM Research GmbH ze Švýcarska
- 10 partnerů: IBM Research GmbH (koordinátor projektu), Politecnico di Milano, Università della Svizzera Italiana, Technische Universität Dresden, Centro Internazionale in Monitoraggio Ambientale, IT4Innovations, VSB – Technical University of Ostrava, Virtual Open Systems SAS, Duferco Energia Spa, Numtech, Sygic a.s.

Více informací naleznete zde.

SPOLEČNOST SYGIC

Společnost Sygic, která byla založena v roce 2004 v Bratislavě, je předním developerem mobilních GPS offline navigací určených pro běžné zákazníky, firemní flotily i profesionální řidiče. Sygic také vyvinul vlastní mapovou a navigační platformu na zpracování dat pro inteligentní dopravu Smart Mobility Platform.

Pro více informací navštivte web.



Tento projekt získal finanční podporu z programu Evropské unie pro výzkum a inovace Horizont 2020 na základě grantové dohody č. 957269.

PROBĚHLO U NÁS NEBO S NÁMI

4. KONFERENCE UŽIVATELŮ IT4INNOVATIONS PROBĚHLA VIRTUÁLNĚ

I my držíme krok s dobou, a tak u nás 5. listopadu 2020 proběhla 4. konference uživatelů IT4Innovations zcela virtuálně. I přes online formát se jí zúčastnilo 68 hostů! Konference přinesla informace o plánech, které chystáme v oblasti infrastruktury i o nových službách souvisejících s naším zapojením do e-INFRA CZ či LUMI konsorcia. Konferenci provedl přítomný Branislav Janský, ředitel superpočítačových služeb a Jan Heyda z Ústavu fyzikální chemie VŠCHT Praha a předseda Rady uživatelů IT4Innovations.

V rámci konference proběhly čtyři keynote přednášky našich uživatelů, které vybral programový výbor:

- Dominik Legut (IT4Innovations) „Lattice vibrations and the trimerons order of magnetite at Verwey transition“
- Jiří Klimeš (Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy) „Precision in ab initio calculations“
- Michalis Kouriotis (Astronomický ústav Akademie věd ČR) „Multiple Stellar Generations Within Globular Clusters“
- Petr Strakoš (IT4Innovations) „Research and development of an input data generator for obstacle detection training in simulated environment“

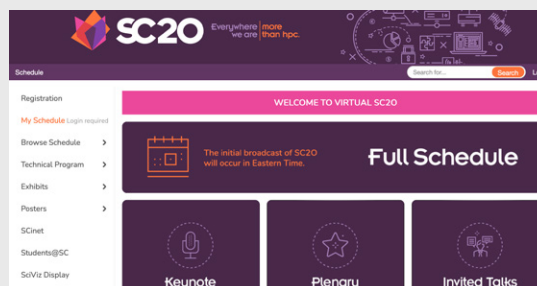
V posterové sekci bylo prezentováno 19 posterů z různých vědních oborů.

Postery naleznete ZDE

SUPERCOMPUTING CONFERENCE SC20

Online konference SC20 otevřela své virtuální brány ve dnech 9. až 19. listopadu. IT4Innovations ani tentokrát nechybělo mezi vystavovateli, byť jen s virtuálním stánkem. Jakub Beránek a Stanislav Böhms z IT4Innovations prezentovali 11. listopadu v rámci sekce workshopů „Runtime vs Scheduler: Analysing Dask's Overheads“.

Prezentace k vidění ZDE

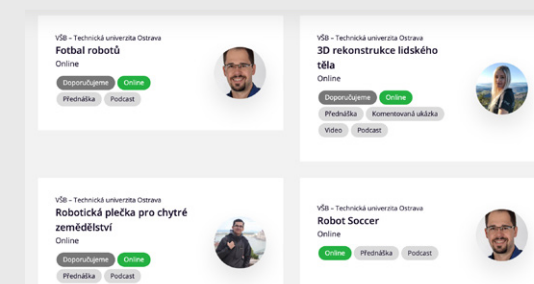


V rámci Supercomputing Conference proběhlo vyhlášení žebříčku TOP500 nejvýkonnějších superpočítačů světa. Vítězem je opět japonský Fugaku. Náš Salomon je i po 5 letech provozu stále v žebříčku, i když se propadl na 462. místo. Také jste zvědaví, jak si povede superpočítač Karolina, který bude uveden do provozu tento rok?

Aktuální žebříček TOP500

POSLECHNĚTE SI PODCASTY Z NOCI VĚDCŮ

Online formátu se dočkala také největší akce, kterou pořádáme v prostorách IT4Innovations pro širokou veřejnost. Obvyklá návštěvnost této akce je kolem 700 osob. Abychom zájemce neochudili o novinky z výzkumu, který u nás probíhá, připravili jsme zajímavé podcasty. Poslechněte si je také. Václav Svatoň vám přiblíží, jak vypadá Fotbal robotů, Petra Svobodová vám poví, proč je budoucnost medicíny ve 3D vizualizaci a virtuální realitě a Jakub Beránek odpoví na otázku, jak funguje chytrý zemědělský stroj 21. století.



Fotbal robotů

3D rekonstrukce lidského těla

Robotická plečka pro chytré zemědělství

