

NEWSLETTER Q2/2020

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM

Spustili jsme nový web

Změny se dočkal nejen design stránek, ale také obsah. Nový web je plně responzivní a dostupný na mobilních zařízeních.

05

Přispěli jsme k výzkumu, který se dostal na obálku časopisu Science

Vědecký tým ze skupiny Pavla Jungwirtha z ÚOCHB AV ČR a jeho projekt se dostal na obálku jednoho z nejprestižnějších a nejcitovanějších vědeckých časopisů světa – Science.

07

Aktivně jsme se zapojili do boje s COVID-19

IT4Innovations se zapojilo několika aktivitami, aby boji s koronavirem pomohlo.

09

Aktuální stav dopravy na silničních tazích a ve vybraných městech v nové aplikaci viaRODOS

Aplikace využívá datových zdrojů poskytovaných NDIC, které spadá pod ŘSD ČR. Uživatelé tak dostávají nejaktuálnější data o dopravě na silničních tazích a ve vybraných městech ČR.

12

Vyzkoušejte novou službu na podporu výzkumu a vývoje

IT4Innovations nabízí službu na podporu výzkumu a vývoje. Jedná se o bezplatnou asistenci v oblasti optimalizace výkonu paralelních aplikací.

15

ESPRESO – Masivně paralelní knihovna pro inženýrské aplikace

Představujeme první z našich vlajkových lodí ve vědě a výzkumu.

17

Pořízený software usnadní práci našim uživatelům

Software pomůže jak výzkumným pracovníkům či IT specialistům IT4Innovations, tak i uživatelům výzkumné infrastruktury. Přinášíme přehled pořízeného software a jeho hlavní přednosti.

23

Nová infrastruktura pro projekt LEXIS v IT4Innovations a LRZ

Infrastruktura významně pomůže při řešení projektu LEXIS, jehož je IT4Innovations koordinátorem.

26

KRÁTCE

20. VEŘEJNÁ GRANTOVÁ SOUTĚŽ

O výpočetní zdroje IT4Innovations si v rámci 20. Veřejné grantové soutěže můžete zažádat do 31. července 2020.

[Více informací ZDE](#)

E-INFRA CZ MÁ NOVÉ LOGO

e-INFRA CZ je unikátní e-infrastruktura pro výzkum a vývoj ČR, kterou tvoříme společně s CESNETem a CERITem-SC.



KONEC ZÁRUČNÍ PODPORY ANSELM

Záruční podpora pro Anselm od dodavatele končí 18. května 2020. Od té doby bude Anselm běžet v režimu údržby, a to až do konce roku 2020. Během tohoto období již nebudeme schopni plně zaručit bezpečnost a konzistenci uložených dat, proto se důrazně doporučuje, abyste si citlivá data zálohovali mimo Anselm.

Pro další informace se neváhejte obrátit na naši podporu

support@it4i.cz

ÚSPĚCH ČLÁNKU K PROJEKTU READEX

Článek „Domain Knowledge Specification for Energy Tuning“, na kterém se podíleli naši kolegové Lubomír Říha, Ondřej Vysocký, Martin Beseda a Jan Zapletal patří mezi 10 % nejstahovanějších příspěvků v „Concurrency and Computation: Practice and Experience“.

[Přečtete si článek](#)

KRÁTCE

**STARTUJE PRACE
SUMMER OF HPC**

Startuje další ročník **Summer of HPC**, v rámci kterého budeme hostit tři studenty. Marco Mattia a Denizhan Tutar budou pod vedením Martina Besedy a Rajka Cosice pracovat na projektu **Development of visualization tool for data from molecular simulations**. Andres Vicente Arevalo bude pod vedením Georga Zitzlsbergra a Martina Golasowského zpracovávat projekt **Object Detection Using Deep Neural Networks – AI from HPC to the Edge**. Ani této akci se nevyhnula opatření související s koronavirem, a proto letos probíhá pouze vzdáleně.

**WEBINÁŘ EOSC
LANDSCAPING**

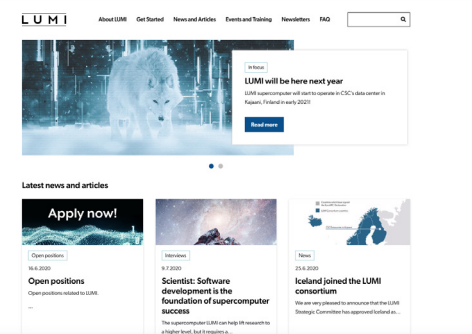
e-INFRA CZ uspořádala **webinář** věnovaný problematice European Open Science Cloud (EOSC) a EOSC Landscaping a jeho výsledkům v ČR, který se uskutečnil online 23. června. Na webináři zazněly informace o současném stavu a směřování EOSC, hlavním tématem bylo seznámení s výsledky průzkumu EOSC mezi českými výzkumnými infrastrukturami, e-infrastrukturami a donátory vědy.

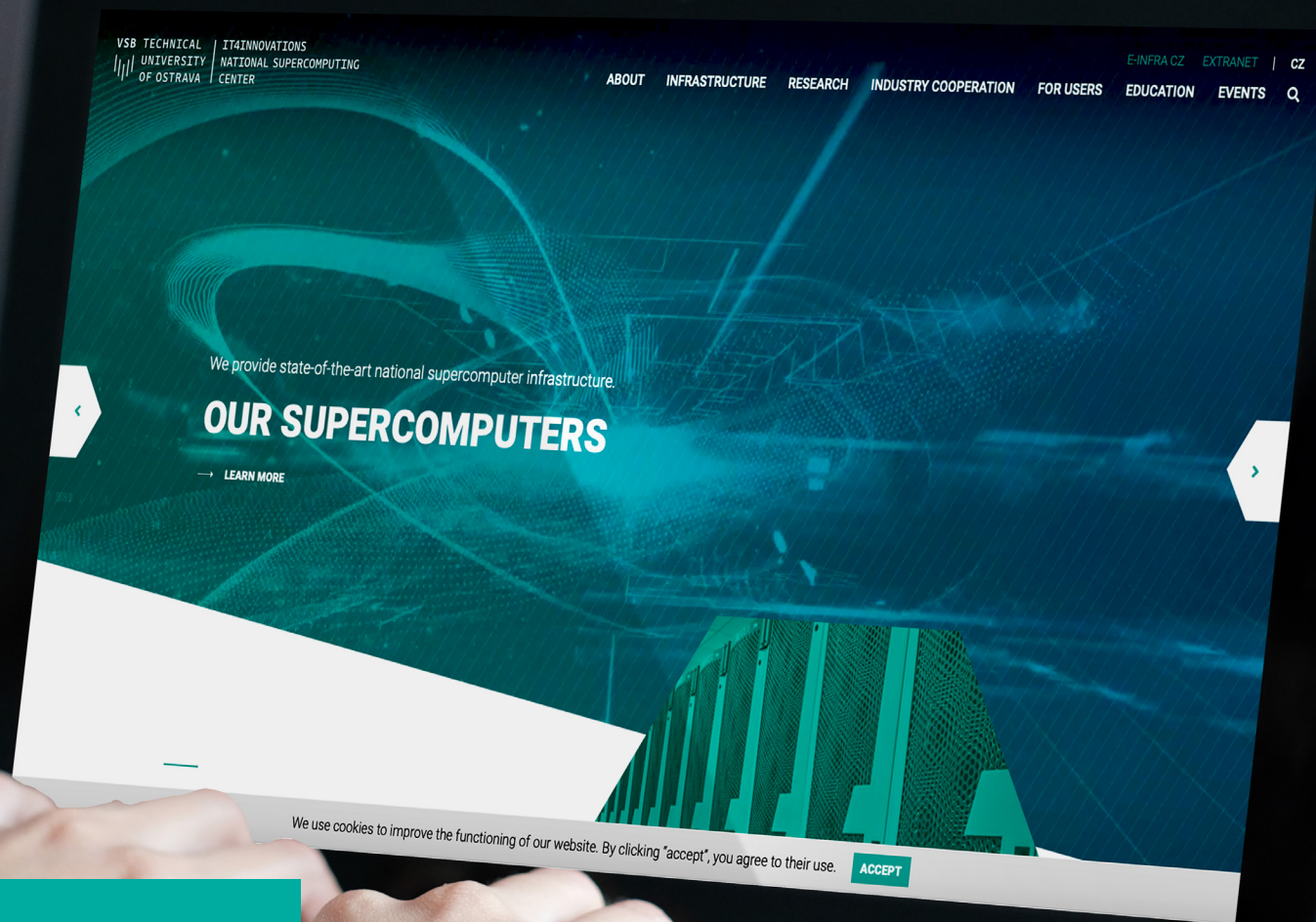
[Prezentace ke shlédnutí ZDE](#)

LUMI MÁ NOVÝ WEB

Nové stránky konsorcia LUMI, jehož je IT4Innovations součástí, jsou zprovozněny.

[Prohlédnout web ZDE](#)





SPUSTILI JSME NOVÝ WEB



Spustili jsme nový web

V červnu jsme spustili novou webovou prezentaci v češtině i angličtině. Web můžete navštívit na adrese www.it4i.cz. Změny se dočkal nejen design stránek, ale také obsah. Nový web je plně responzivní a dostupný na vašich mobilních zařízeních.

Adresy na [Extranet](#), [Docs](#) a přístup k našemu [HelpDesk](#) jsou stále platné.

Věříme, že nalezení potřebných informací na novém webu usnadní vaši práci.

V hlavních sekcích najdete mimo jiné tyto informace:

- **O SPOLEČNOSTI** – publikace, tiskové zprávy, organizační struktura, členství atd.,
- **INFRASTRUKTURA** – podrobné informace o našich stávajících a plánovaných clustrech a provozních technologiích,
- **VÝZKUM** – jaké projekty v současné době řeší IT4I nebo naši uživatelé,
- **PRŮMYSLOVÁ SPOLUPRÁCE** – portfolio našich služeb pro průmyslové partnery a příklady spolupráce s nimi,
- **PRO UŽIVATELE** – jak získat výpočetní prostředky, otevřené grantové výzvy se všemi potřebnými dokumenty a formuláři,
- **VZDĚLÁVÁNÍ** – vzdělávací aktivity, náš doktorský a studijní program, Doktorská škola,
- **AKCE** – pro vědeckou komunitu, naše uživatele i širokou veřejnost.



www.it4i.cz



Rethinking the stellar explosions
that mark cosmic distances p. 1046

Mangrove survival in
rising seas pp. 1050 & 1118

Next-generation fluorocarbons
in the environment pp. 1066 & 1103

Science

\$15
5 JUNE 2020
sciencemag.org

AAAS

METALLIC SOLUTION

Electrolyte-to-metal
transition of electrons dissolved
in ammonia pp. 1056 & 1086

PŘISPĚLI JSME K VÝZKUMU, KTERÝ SE
DOSTAL NA OBÁLKU ČASOPISU SCIENCE

IT4I

Q2
2020

07



back to
content

Přispěli jsme k výzkumu, který se dostal na obálku časopisu Science

Vědecký tým ze skupiny Pavla Jungwirtha z Ústavu organické chemie a biochemie (ÚOCHB) AV ČR a jeho projekt se dostal na obálku jednoho z nejprestižnějších a nejcitovanějších vědeckých časopisů světa – Science. Je pro nás ctí, že IT4Innovations mohlo k tomuto objevu přispět svým dílem, jelikož Pavlu Jungwirthovi přidělilo na jeho výzkum 650 000 jádrohodin svých výpočetních zdrojů.

Článek publikovaný v časopise Science „Photoelectron spectra of alkali metal-ammonia microjets: From blue electrolyte to bronze metal“ odpovídá na otázku co je to kov a jak vlastně vzniká. Pavel Jungwirth ve spolupráci se svými kolegy z ÚOCHB a vědci z Česka, Německa a USA využili pokročilých výpočtů elektronové struktury a fotoelektronové spektroskopie, popsali a na molekulové úrovni zmapovali vznik

kovového roztoku alkalických kovů v amoniaku z původního elektrolytu.

Alkalické kovy rozpuštěné v kapalném amoniaku představují modelové systémy zajímavé pro zkoumání přechodu modrého elektrolytu s nízkou koncentrací rozpuštěných elektronů k bronzově či zlatě zbarvenému kovovému roztoku (s vodivostí srovnatelnou s měděným drátem) s vysokou koncentrací volných elektronů. Ideálním nástrojem pro mapování mikroskopických změn elektronové struktury materiálu, charakteristických pro tento přechod, je fotoelektronová spektroskopie.

Tato technika, která využívá ultravysokého vakua, se dlouho považovala za neslučitelnou se zkoumáním těkavých kapalin, jako je např. kapalný amoniak. První úspěšná fotoelektronová měření

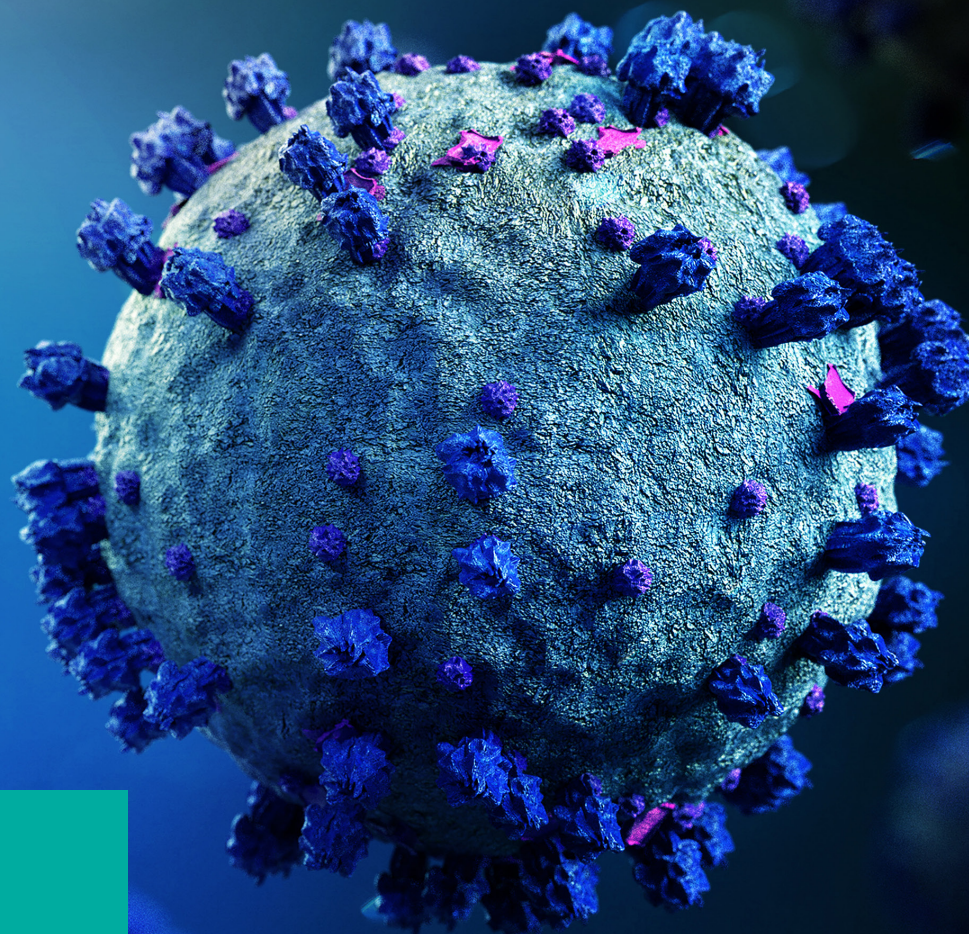
čistého kapalného amoniaku se díky využití techniky mikronástrů podařilo uskutečnit až v roce 2019 týmu Pavla Jungwirtha ve spolupráci s vědci z Jihokaliifornské univerzity a z Ústavu Fritze Habera na berlínském synchrotronu BESSY II.

„Tento úspěch nám otevřel dveře k dalšímu zkoumání systémů alkalických kovů a tekutého amoniaku prostřednictvím fotoelektronové spektroskopie a vyústil v nejnovější publikaci v časopise Science, jež mapuje přechod z elektrolytu ke kovovému roztoku kapalného amoniaku a lithia, sodíku a draslíku. To nám snad do budoucna umožní realizaci našeho 'nejvýbušnějšího' snu, a tím je příprava kovové vody,“ zmínil Pavel Jungwirth.

S využitím fotoelektronové spektroskopie pomocí rentgenového syn-

chrotronního záření výzkumníci poprvé zachytili fotoelektronový signál kolem 2 eV odpovídající elektronům rozpuštěným v tekutém amoniaku. S rostoucí koncentrací alkalického kovu se pak přechod ke kovovému chování projevuje ve fotoelektronovém spektru tvorbou vodivostního pásu s ostrou Fermiho hranou a přidruženými plasmonickými píky.

Společně s nejmodernějšími výpočetními postupy pro stanovení elektronových struktur, na kterých se podíleli také odborníci z MFF UK, tak poskytují tato měření detailní molekulový popis přechodu nekovové látky v kovovou, a tím nám umožňují lépe porozumět, jak vzniká kovové chování a s ním spojené vlastnosti jako velmi vysoká elektrická vodivost.



AKTIVNĚ JSME SE ZAPOJILI
DO BOJE S COVID-19



Aktivně jsme se zapojili do boje s COVID-19

Koronavirus v minulých měsících ochromil ekonomiku řady států, způsobil kolaps nejednoho zdravotnického zařízení a nechal za sebou statisíce mrtvých. Nalezení léku, který by vyléčil nakažené nemocí COVID-19, zaměstnává nyní nejednoho vědce. Proces objevování nových léčiv je však finančně velmi nákladný a léky se dostávají na trh až po mnohaletém testování. S tímto problémem mohou pomoci superpočítače, jež zvládnou testování významně urychlit a tím snížit vynaložené investice. I IT4Innovations se zapojilo několika aktivitami, aby boji s koronavirem pomohlo.

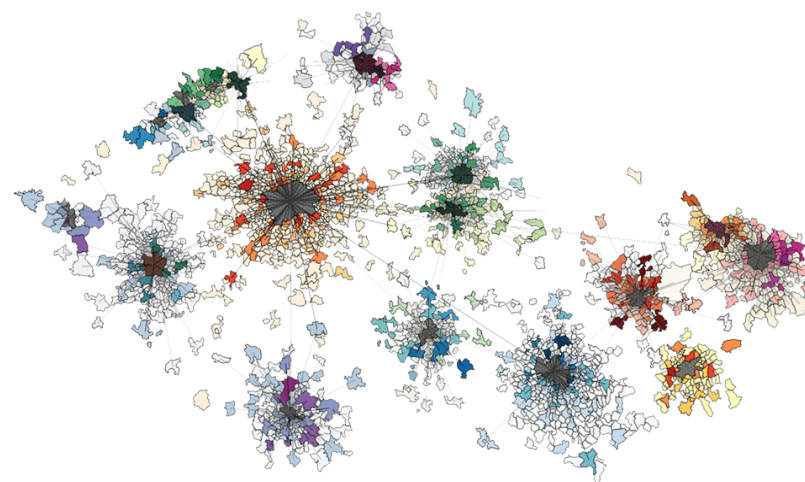
Přednostní přístup k výpočetním zdrojům IT4Innovations

Ihned po vypuknutí pandemie v České republice reagovalo IT4Innovations na aktuální situaci a svým uživatelům nabídlo přednostní přístup k výpočetním zdrojům pro řešení problémů týkajících se výzkumu v souvislosti s nemocí COVID-19. „*Naše uživatele jsme vyzvali, aby se přihlásili, pokud se aktuálně zabývají výzkumem týkajícím se COVID-19. Mohou tak učinit podáním žádosti, které bude při splnění základních podmínek obratem vyhověno a také jim bude prioritně umožněno čerpání výpočetního času. Určitě se nemusí nutně jednat jen o vývoj léků, ale může jít třeba o vývoj nanomateriálů na podporu boje proti*

koronaviru či modelování šíření epidemie,“ uvádí Vít Vondrák, ředitel IT4Innovations. Výpočetní zdroje IT4Innovations byly rovněž nabídnuty k využití pro iniciativu Evropské komise **EUvsVIRUS Hackathon**, který proběhl 24. až 26. dubna. Cílem celoevropského hackathonu bylo vyvinout inovativní řešení k překonání společenských výzev souvisejících s koronavirem. Více informací <https://euvsvirus.org>

Atlas mobility

Dalším významným projektem, za kterým stojí Laboratoř pro big data analýzy Miroslava Vozňáka, je Atlas mobility. Jedná se o primární datové rozhraní předávající informace o mobilitě osob v ČR během nouzového stavu zpracovaných z anonymizovaných provozních údajů společnosti T-Mobile CZ s využitím výpočetních zdrojů IT4Innovations. Naše superpočítače zpracovávají anonymizované záznamy z mobilní sítě a poskytuje v agregované podobě informace o pohybech s granularitou až na základní územní jednotky. „*Dle pokynů T-Mobile Czech Republic vytváříme přístupy do portálu mobility, kde si lze dle přidělených rolí vytvářet různé sestavy. Vše běží autonomně a zatím bez problémů, ačkoliv do portálu permanentně zasahujeme a náhledy upravujeme dle potřeb,*“ vysvětluje Miroslav Vozňák.



Atlas mobility

Spolupráce s Politecnico di Milano při hledání léků proti koronaviru

IT4Innovations opětovně navázalo spolupráci s italskou univerzitou Politecnico di Milano a nabídlo ji pomocnou ruku při výzkumu souvisejícím s nejdiskutovanější nemocí v současné době – COVID-19.

„V rámci spolupráce budeme testovat nové algoritmy a metody pro objevování terapeutického řešení koronaviru také na našich superpočítačích. Hlavním cílem tohoto výzkumu je připravit půdu pro rychlou reakci při případné pandemii, přičemž se do budoucna počítá i s využitím platformy LEXIS, která prolíná výhody vysoko-výkonnostního počítání, cloudu a práce s velkými datovými soubory. LEXIS umožní otestovat algoritmy napříč různými superpočítačovými centry, což povede k experimentům ve velkém měřítku,“ uvedl vedoucí Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace IT4Innovations a hlavní řešitel projektu LEXIS Jan Martinovič.

IT4Innovations jediným českým zástupcem v prestižní lize Exscalate4COV

Členové ligy Exscalate4COV, mezi které nyní patří i IT4Innovations, aktivně pracují na nalezení léčiv proti koronaviru. Řadí se mezi ně průmyslové a vědecké subjekty, jež nejsou formálně součástí konsorcia, ale přispívají materiálem, znalostmi nebo jinými prostředky v tomto projektu.

„V rámci Exscalate4COV byl již proveden počáteční výzkum s omezenou databází 10 tisíc dostupných léčiv a největší výzvou, které momentálně čelíme, je její rozšíření na více než 500 miliard molekul. S tímto by nám mohly pomoci právě superpočítače. Ty urychlí výběr pouze těch potenciálně nejvhodnějších molekul, jež se odešlou do následujících fází procesu vývoje nových léčiv. Naše spolupráce s IT4Innovations, která proběhla v rámci projektu ANTAREX, byla úspěšná a od té nynější si slibujeme další zrychlení výpočetního procesu, což značně usnadní boj s budoucí pandemií,“ uvedl Gianluca Palermo, hlavní vědec projektu Exscalate4COV z institutu Politecnico di Milano.

EXSCALATE 4COV

Více informací [ZDE](#)



PŘEDSTAVUJEME NOVOU
APLIKACI VIARODOS

Představujeme novou aplikaci viaRODOS

IT4Innovations představuje aktualizovanou aplikaci viaRODOS, jež byla vyvinuta v rámci projektu RODOS a která spolupracuje se systémem Floreon+. Aplikace využívá datových zdrojů poskytovaných Národním dopravním informačním centrem (NDIC), které spadá pod Ředitelství silnic a dálnic ČR. Uživatelé tak dostávají nejaktuálnější data o dopravě na silničních tazích a ve vybraných městech ČR.

Před 14 lety vyvinuly výzkumné týmy na VŠB – Technické univerzitě Ostrava aplikaci Floreon+ k vyhodnocování informací pro rozhodování v rámci procesů krizového řízení, zejména povodní. V letošním roce vědci v IT4Innovations národním superpočítačovém centru modernizovali aplikaci viaRODOS, vyvinutou v rámci Centra pro rozvoj dopravních systémů RODOS, a propojili ji se systémem Floreon+. Důležitou součástí provedené mo-

dernizace je napojení na nové datové zdroje z plošného monitorovacího telematického systému (FCD) pořízené Ředitelstvím silnic a dálnic ČR.

Uživatelům především z řad řidičů přináší nová modernizovaná aplikace viaRODOS, která je přístupná přes webové rozhraní na www.viarodos.cz, aktuální data o dopravě nejen na dálnicích a silnicích v ČR, ale také uzavírky a omezení v dopravě ve vybraných městech, a to vše v reálném čase.

IT4Innovations se nyní stává novým provozovatelem viaRODOS.

„Velmi mě těší, že projekty, které na VŠB – Technické univerzitě Ostrava vznikly před mnoha lety, nacházejí využití i po tak dlouhé době. Modernizovaná aplikace viaRODOS najde široké uplatnění nejen mezi občany ČR, ale také u odborníků z oblasti krizového řízení,“ uvádí Ivo Vondrák, hejtman

Moravskoslezského kraje, který ještě jako rektor VŠB – Technické univerzity Ostrava stál u zrodu aplikace Floreon+. viaRODOS ukazuje aktuální dopravní situaci na vybraných komunikacích ČR, a to s pomocí jednoduché liniové grafiky, ale také v rámci mapové vizualizace s aktualizací dat v minutovém intervalu. Pro zajímavost uvádíme, že data z aplikace viaRODOS ve svém zpravodajství aktivně využívá také Česká televize.

„Věřím, že spolupráce VŠB a ŘSD v oblasti telematiky a zpracování takzvaných big dat z dopravy se bude i nadále rozvíjet. Projekt FCD je důkazem toho, že se dá úspěšně převést výsledek vědy a výzkumu do praxe. O to více nás potěšil fakt, že informace z plošného monitorovacího telematického systému se vrátila zpět na akademickou půdu a jistě najde i další využití než jenom základní zobrazení v mapě. Pro úplnost dodejme, že informace z ploš-

ného telematického zdroje, obdobně jako dopravní informace, jsou zdarma dostupné z NDIC všem odběratelům ve formě otevřených dat,“ říká Filip Týc, vedoucí odboru silniční databanky a NDIC na Ředitelství silnic a dálnic ČR, který se podílel na uvedeném projektu.

„Aplikaci viaRODOS jsme v IT4Innovations převzali v lednu letošního roku pod svou správu a propojili ji s novými datovými zdroji Národního dopravního informačního systému. V rámci aktualizace aplikace došlo i k propojení se systémem Floreon+, který nám umožňuje vylepšit možnosti aplikace viaRODOS v oblasti vizualizace telematických dat v rámci mapového podkladu. Uživatel se také může podívat na vývoj dopravní situace v čase,“ dodává Jan Martinovič z IT4Innovations, jehož tým z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace aplikací spravuje.

STRUČNĚ O APLIKACI VIARODOS

Na hlavní stránce je zobrazen přehled hlavních silničních tahů v ČR, ke kterým jsou vytvořeny podrobnější vizualizace na samostatných stránkách. Menu aplikace umožňuje uživateli přesun mezi dalšími nabídkami zobrazujícími aktuální dopravní situaci vybraných měst v ČR. V horní části obrazovky se nachází černý pruh s názvem aktuální stránky a zbývajícím časem do další automatické aktualizace.

Aplikace poskytuje dva typy informací o dopravě:

- Liniová grafika – volba kliknutím přes nabídku „Hlavní silniční tahy“ umožňuje náhled na celkovou dopravní situaci u vybraných tras a zobrazuje aktuální situaci formou celkového přehledu. Trasa zachycuje buď jednu konkrétní silnici nebo dopravní tah mezi počátečním a koncovým bodem, který se skládá z několika silničních úseků. Detaily trasy pak zobrazují podrobnější informace jako rychlost dopravního proudu, zpoždění na jednotlivých úsecích, dopravní omezení atd.
- Mapové informace – po výběru Česká republika či kliknutím na název města se zobrazí mapa s využitím aplikace Floreon+. Hlavní silniční tahy v České republice zasazené do mapy představují rychlý náhled na celkovou dopravní situaci s možností zobrazení historie vývoje situace díky časové ose v aplikaci Floreon+. Aplikace také umožňuje nastavit si zobrazení různých vrstev s dopravními informacemi.



Další informace o aplikaci jsou k nalezení [ZDE](#)



VYZKOUŠEJTE NOVOU SLUŽBU
NA PODPORU VÝZKUMU A VÝVOJE



Vyzkoušejte novou službu na podporu výzkumu a vývoje



Projekt POP2, což je zkratka názvu Performance Optimisation and Productivity 2, navazuje na úspěšně realizovaný projekt POP, jehož start datujeme již do roku 2015. IT4Innovations prostřednictvím projektu POP2 nabízí službu na podporu výzkumu a vývoje, kterou poskytuje v rámci mezinárodního projektu Centrum excelence. Jedná se o bezplatnou asistenci v oblasti optimalizace výkonu paralelních aplikací. Služba je určena nejen pro všechny akademicko-vědecké pracovníky, ale i pracovníky firem, kteří vyvíjí nebo používají paralelní kódy a nástroje a hodí se jim odborná pomoc s jejich optimalizací pro efektivní spuštění na výkonných superpočítačích.

„Hlavní náplní POP2 je asistence s analýzou paralelních aplikací, identifikace problémových částí kódů a doporučení optimalizačních technik vedoucích k vyššímu výkonu a lepší škálovatelnosti dané aplikace,“ upřesňuje Lubomír Říha, vedoucí

Laboratoře pro výzkum infrastruktury a hlavní řešitel projektu POP2. Centrum excelence pro optimalizaci výkonu a produktivity ve výpočetních aplikacích obdrželo finanční prostředky na odhalování neefektivností a jejich příčin v paralelních kódech od Evropské komise. První fáze projektu byla úspěšně dokončena v březnu 2018 a této služby bylo využito ve 158 případech, kdy došlo k prověření velkého množství paralelních aplikací. Druhá fáze projektu byla zahájena v prosinci 2018 a potrvá tři roky.

Více informací o projektu a konkrétní příklady některých úspěšných realizací naleznete na webových stránkách <https://pop-coe.eu/>. Tyto služby jsou zdarma pro všechny organizace se sídlem v Evropské unii, proto neváhejte a v případě zájmu nás kontaktujte prostřednictvím e-mailu: info@it4i.cz.

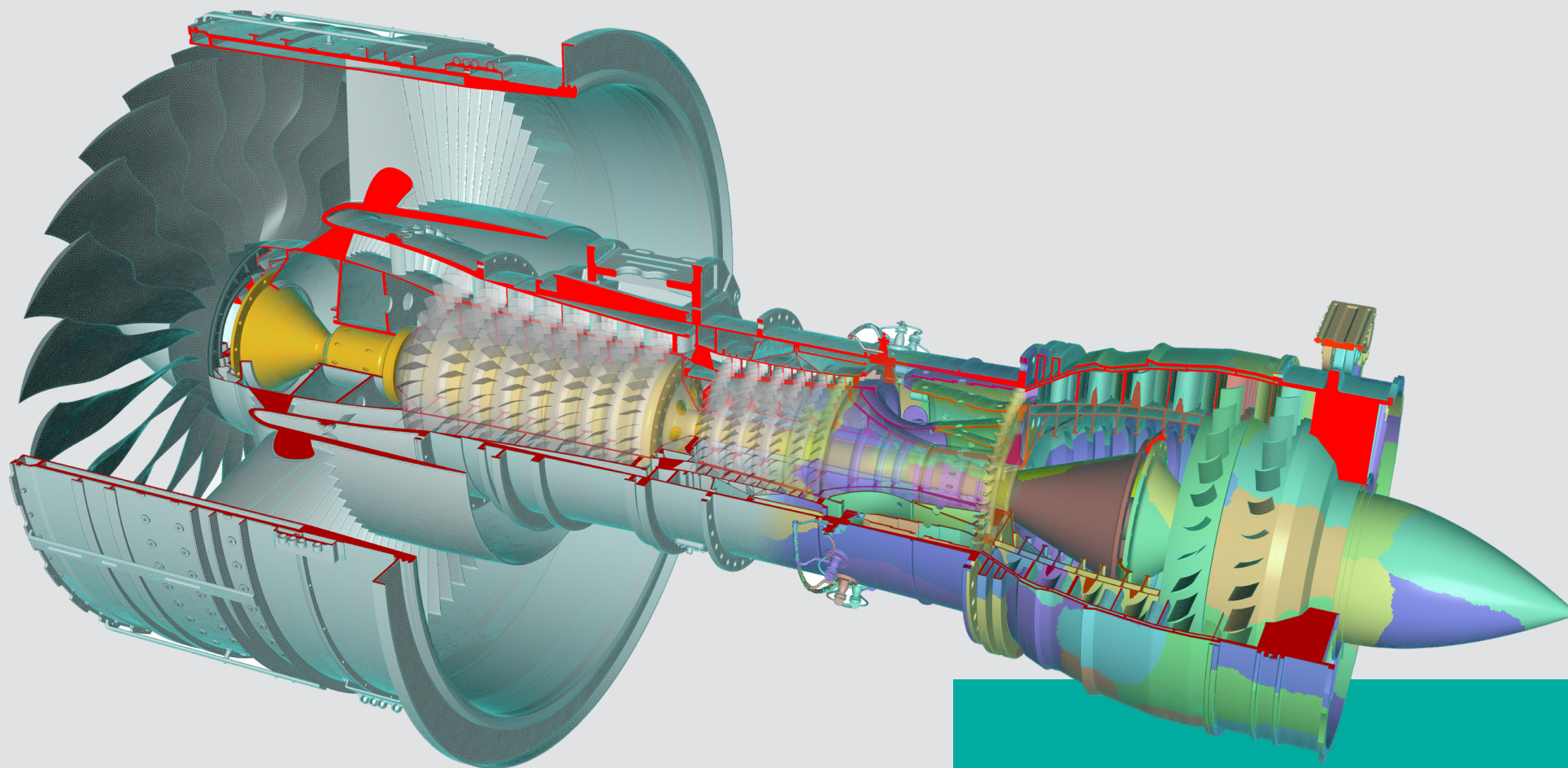
PROJEKT POP2 (PERFORMANCE OPTIMISATION AND PRODUCTIVITY 2)

- **2018 až 2021**
- **financovaný programem Evropské unie Horizont 2020**
- **8 partnerů: BSC (Španělsko), Universitaet Stuttgart (Německo), Forschungszentrum Jülich (Německo), RWTH Aachen (Německo), Numerical Algorithms Group (Velká Británie), Teratec (Francie), Univerzita Versailles Saint Quentin en Yvelines (Francie) a VŠB-TUO / IT4Innovations národní superpočítačové centrum (ČR).**

[Více o projektu POP2 ZDE](#)



Projekt POP2 získal finanční podporu z programu Evropské unie pro výzkum a inovace Horizont 2020 na základě grantové dohody č. 824080.



ESPRESSO – MASIVNĚ PARALELNÍ
KNIHOVNA PRO INŽENÝRSKÉ APLIKACE

Nejnovější technologický pokrok v oblasti výpočetní techniky přinesl významnou změnu v koncepci návrhu nového produktu, řízení výroby nebo autonomních systémů. V posledních několika letech jsme byli svědky výrazného přechodu k virtuálnímu prototypování a postupného tlaku na integraci velké části průmyslového sektoru do čtvrté průmyslové revoluce neboli Průmyslu 4.0. Za tímto účelem nabízejí výzkumné laboratoře IT4Innovations (IT4I) své znalosti a zkušenosti s vývojem a implementací nových paralelních metod a algoritmů pro výpočetně náročné numerické simulace ve strojírenství, stavebnictví, biomechanice a energetickém průmyslu.

Nechte superpočítače ušetřit váš čas a prozkoumejte hlubší možnosti návrhu vašich produktů

IT4I vyvíjí v rámci svých výzkumných aktivit open source simulační balík ESPRESO. Ten je určen k řešení náročných problémů průmyslové praxe a při jeho vývoji je kladen důraz na optimální využití vysoko-výkonnostní výpočetní infrastruktury (HPC) neboli superpočítačů. Balík je distribuován na základě bezplatné open-source licence, což výrazně zjednodušuje aplikaci automatizovaných simulačních řetězců jako jsou výpočetní šablony vytvořené na míru specifického portfolia výrobků, nebo pro snadnou opakovatelnost výpočtů, a to bez jakýchkoli licenčních poplatků a závazků. Každý jednotlivý modul softwarového balíku je od samého počátku vyvíjen jako paralelní kód založený na vysoce škálova-

telných numerických metodách a algoritmech. Tímto způsobem můžeme zajistit optimální využití nejmódnějších superpočítačů. Přidanou hodnotou balíku je naše implementace masivně paralelního lineárního řešiče založeného na metodách doménové dekompozice FETI, který je schopen řešit problémy o velikostech přesahujících stovky miliard neznámých.

Balík obsahuje několik logických jednotek, jež lze kombinovat tak, aby odpovídaly konkrétním požadavkům při řešení daného problému. Tyto jednotky zahrnují předzpracování vstupních dat, zpracování výpočetní sítě, sestavení numerického modelu, řešení specifického fyzikálního problému pomocí masivně paralelního řídkého lineárního řešiče v kombinaci s dostupnými nelineárními řešiči a konečnou přípravu výstupních dat pro vizualizaci či on-line monitoring dosažených výsledků. Další klíčovou vlastností balíku je jeho jednoduché a flexibilní konfigurační rozhraní, díky kterému lze snadno ovládat všechny moduly pomocí jednotné konfigurace. Toto rozhraní lze snadno rozšiřovat a díky jeho jednoduché podobě lze rozhraní propojit přes webový portál se systémem HPC-as-a-Service, jenž je vyvíjen Laboratoří pro náročné datové analýzy a simulace IT4I. HPC-as-a-Service je dobře známý termín v oblasti vysoce výkonných počítačových systémů, který umožňuje uživatelům přístup k HPC infrastruktuře bez nutnosti kupovat a spravovat vlastní fyzické servery nebo infrastrukturu datových center. Prostřednictvím

této služby mohou uživatelé využít HPC technologie bez předchozí investice do hardwaru. Tento přístup dále snižuje vstupní bariéru pro uživatele a malé a střední podniky, které mají zájem o využití masivně paralelních počítačů, ale často nemají v této oblasti nezbytnou úroveň odborných znalostí. Více se o této službě dozvíte v rámci představení flagshipu „HPC platformy pro spuštění vědeckých úloh“ v následujícím čísle Newsletteru, nebo na našich webových stránkách.

ESPRESO – KLÍČOVÉ VLASTNOSTI

- **komplexní open source konečno-prvkový řešič pro HPC infrastrukturu,**
- **propojení s oblíbenými komerčními a open source nástroji,**
- **škálovatelné řešiče pro nejvýkonnější superpočítače,**
- **jednoduché rozhraní pro automatizovaná řešení.**

Více o knihovně ESPRESO [ZDE](#)



ESPRESO – RYCHLÝ A ŠKÁLOVATELNÝ VSTUP

I/O modul balíku ESPRESO je navržen tak, aby umožňoval efektivně načíst i sekvenční databázové soubory obsahující nestruturované výpočetní sítě a provádět kvalitní doménovou dekompozici. Je vyvíjen od základu jako vysoce paralelní nástroj určený pro HPC prostředí včetně vysoce výkonných úložných systémů.

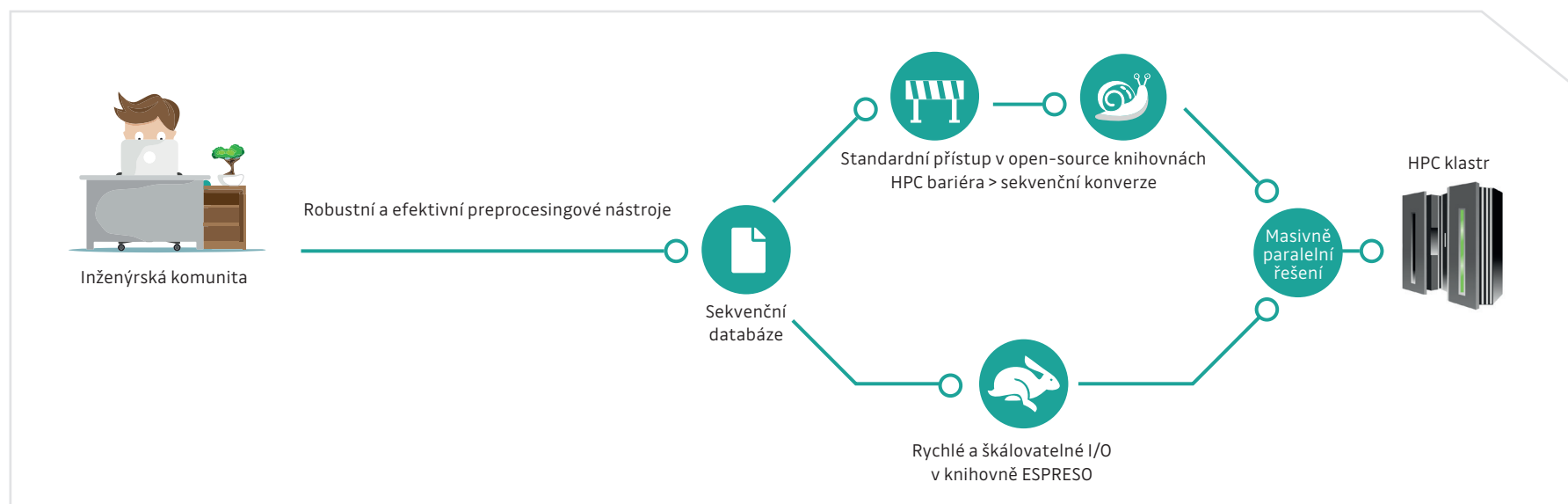
Naší motivací při vývoji I/O modulu bylo propojení nástrojů pro vytváření komplexních inženýrských modelů (jako ANSYS, HyperMesh, ANSA, ABAQUS atd.) spolu s open-source paralelními řešiči. Toto přímé propojení umožňuje jednak širší využití HPC technologií bez dodatečných nákladů na komerční licence při opakovaných výpočtech nebo při řešení nestandardních problémů, ale zároveň umožňuje využití robustních komerčních pre-processingových nástrojů pro

přípravu složitých sestav, kde jsou kladeny vysoké nároky na kvalitu výpočetní sítě.

Modul lze použít dvěma způsoby. Buď jako paralelní konvertor mezi různými formáty anebo jako přímý zavaděč a předprocesor pro masivně paralelní řešiče balíku ESPRESO. Ve druhém případě může uživatel použít databázový soubor uložený ve svém oblíbeném formátu a využít ho pro více výpočtů. Každý výpočet může být proveden s použitím jiného počtu výpočetních uzlů bez dalších omezení, protože náš přístup nevyžaduje spuštění na fixním počtu MPI procesů nebo domén jako v případě paralelního binárního souboru. Toto řešení umožňuje použít různé množství výpočetních zdrojů na základě potřeb nebo dostupnosti výpočetních zdrojů.

Podporované vstupní formáty:

- ANSYS CDB
- EnSight
- VTK
- XDMF
- OpenFOAM
- Abaqus



Paralelní načítání nestruturovaných sítí

- přímý vstup do paralelního řešiče bez nutnosti konverze databázového souboru,
- podpora různých formátů obsahujících nestruturované sítě (podpora nového formátu snadno implementovatelná na základě požadavků uživatele),
- restartování výpočtu s použitím různého počtu alokovaných zdrojů.

Doménová dekompozice

- geometrická dekompozice založená na vyplňování prostoru pomocí Hilbertovy křivky,
- zpřesnění dekompozice pomocí nejmodernějších grafových knihoven s významným zlepšením jejich paralelní škálovatelnosti.

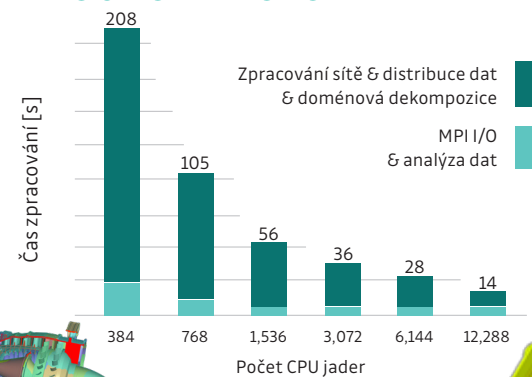
Asynchronní výstup

- překrývání probíhajícího výpočtu ukládáním výsledků řešení,
- výstup do běžně používaných formátů EnSight, VTK,
- monitorování výsledků vybraných regionů pro statistické a optimalizační nástroje,
- restart řešení bez vazby na předchozí počet výpočetních zdrojů.

Proudový motor

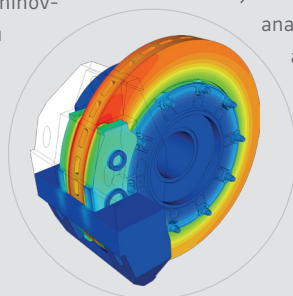
- Sekvenční databázový soubor – velikost 150 GB
- Sít' načtena a dekomponována za 14 sekund
- 822 milionů výpočetních bodů
- 12 288 CPU jader

TEST SILNÉ ŠKÁLOVATELNOSTI I/O MODULU – PROUDOVÝ MOTOR



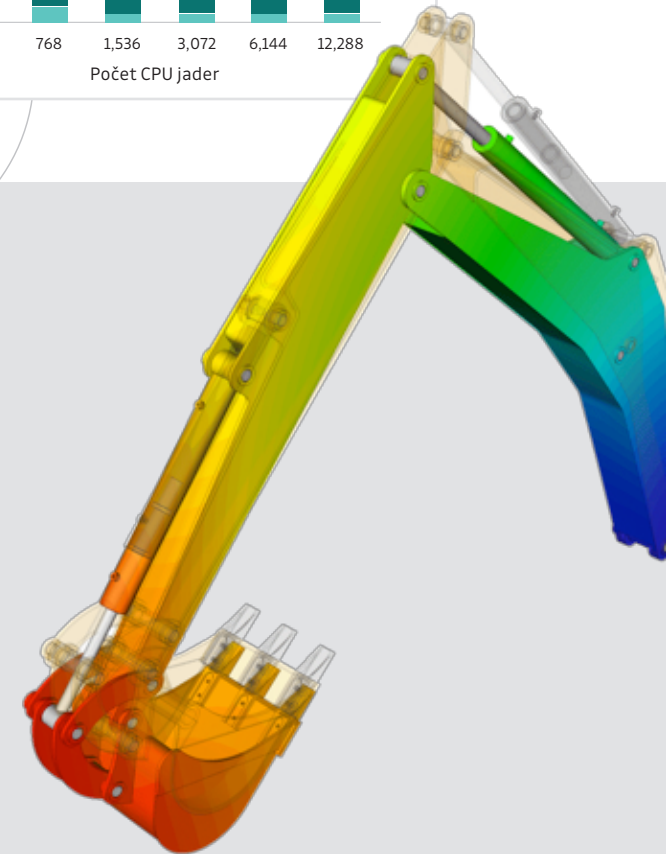
ESPRESSO – MKP KNIHOVNA

Jednou z hlavních částí našeho produktu je komplexní MKP modul pro popis fyzických procesů. Vývoj tohoto modulu je navázán na spolupráci s průmyslovými partnery IT4I a řešené projekty na národní i mezinárodní úrovni. Všechny části MKP modulu obsahují vysoce škálovatelné metody umožňující plné využití výpočetní kapacity nejmodernějších superpočítačů. Uceleným modulem MKP knihovny je například modul pro řešení problémů přenosu tepla. Tento modul je navržen tak, aby řešil složité technické problémy s možností zahrnutí všech fyzikálních



aspektů, jako je konvekce, vedení, radiace či advekce, týkajících se nelineárních a časově závislých problémů. Jednoduché konfigurační rozhraní umožňuje kombinovat více analýz, a to jak v ustáleném stavu, tak v závislosti na čase.

Modul pro problémy strukturální mechaniky zahrnuje nelineární materiálové modely, kontaktní problémy, analýzu harmonické odezvy, implicitní časová schémata apod. Kombinací morfování sítí pomocí RBF (Radial Basis Function), interních škálovatelných řešičů a modulární konfigurace lze vytvořit optimální design v krátkém čase.



ESPRESO – MASIVNĚ PARALELNÍ ŘEŠIČ

Knihovna ESPRESO obsahuje několik vysoce škálovatelných řešičů založených na metodách doménové dekompozice, vyvíjených v rámci interní výzkumné skupiny, které umožňují plné využití kapacit nejmodernějších superpočítačů dneška a řeší tak problémy o stovkách miliard neznámých.

- In-house masivně paralelní řešič založený na víceúrovňových metodách doménové dekompozice FETI schopný řešit miliardy neznámých,
- CPU verze pro masivně paralelní systémy,
- verze s možností využití NVIDIA GPU akceleratorů,
- metody kvadratického programování pro řešení kontaktních problémů,
- automatické ladění nastavení řešiče pomocí evolučních algoritmů.

Úspěšně testováno na velkých petascalových systémech:

- Titan – Oak Ridge National Lab, USA
- Piz Daint – CSCS, Švýcarsko
- Salomon – IT4Innovations, Česká republika

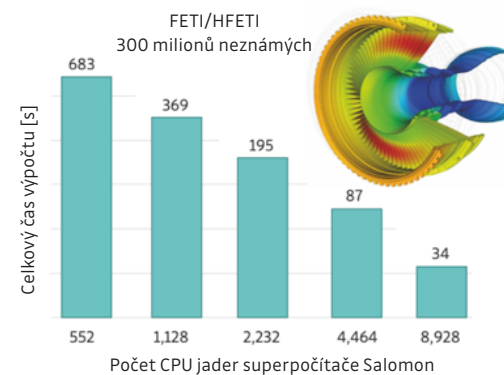
Dostupné řešiče třetích stran

U vysoce heterogenních systémů lze pro řešení definovaných problémů použít paralelní přímé řešiče nebo algebraický multigríd.

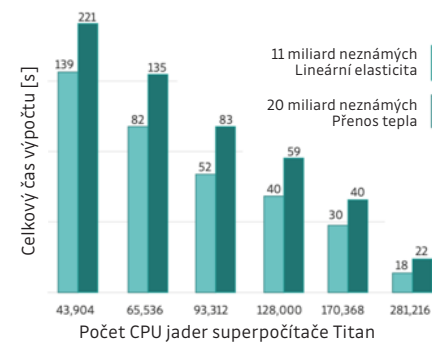
Hlavní autoři knihovny ESPRESO:

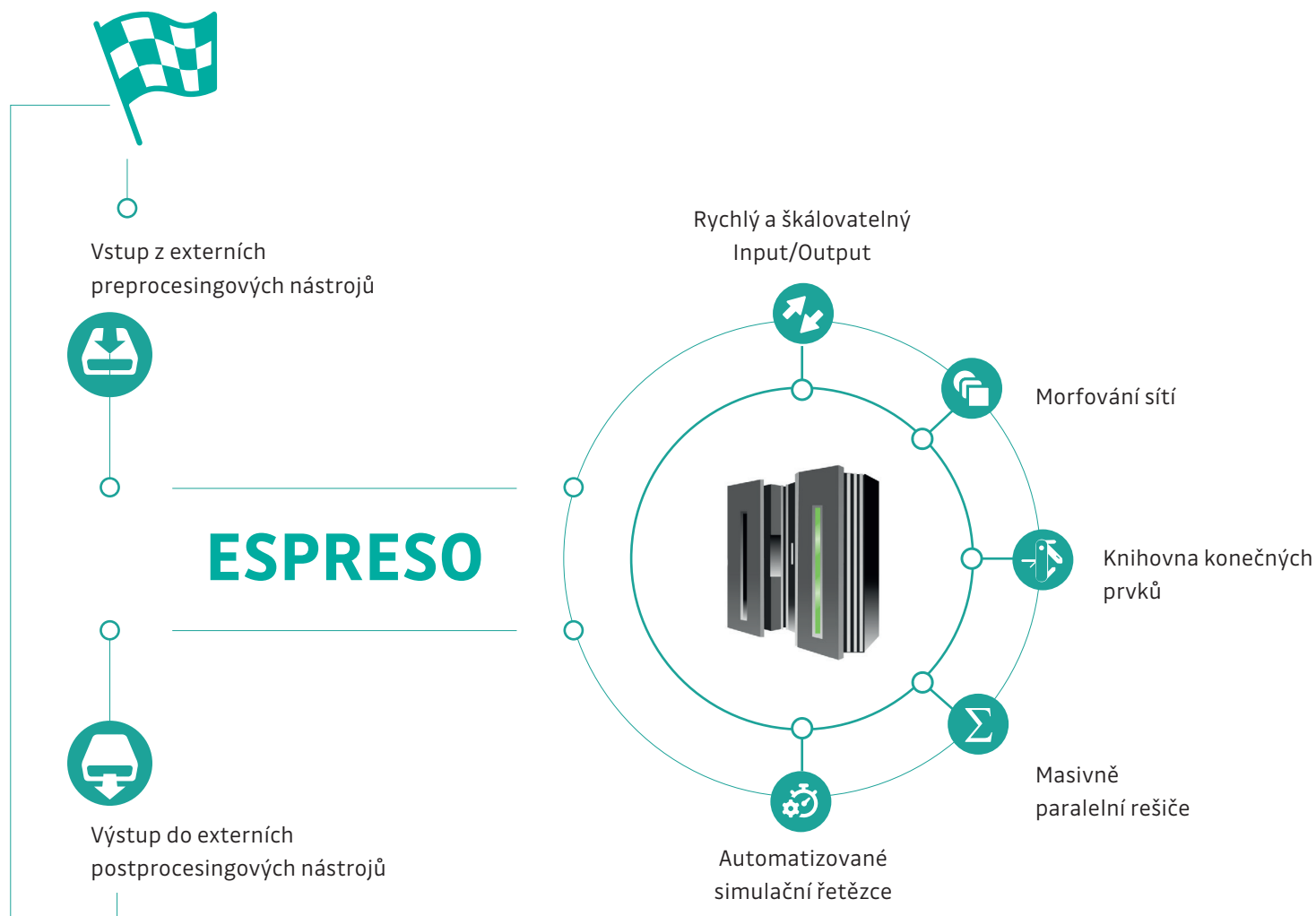
Lubomír Říha, Ondřej Meca, Tomáš Brzobohatý, Oldřich Vlach a Alexandros Markopoulos.

SILNÁ ŠKÁLOVATELNOST – STRUKTURÁLNÍ MECHANIKA



SILNÁ ŠKÁLOVATELNOST – UNIFORMNÍ KOSTKA





Více o knihovně ESPRESO [ZDE](#)



NOVĚ POŘÍZENÝ SOFTWARE
USNADNÍ PRÁCI NAŠIM UŽIVATELŮM



Od roku 2017 běží projekt IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale. Hlavním cílem projektu je rozšíření a modernizace výzkumné infrastruktury IT4Innovations tak, aby byla minimálně udržena stávající technologická úroveň HPC v ČR v porovnání s rozvinutými, zejména evropskými zeměmi. V roce 2019 došlo v rámci tohoto projektu k rozšíření výpočetních kapacit našeho centra o superpočítač Barбора, který postupně nahradí vůbec první superpočítač v IT4Innovations, Anselm. V roce 2020 bude pořízen superpočítač, který svou kapacitou nekolikánásobně předčí Salomon, dosud nejvýkonnější systém IT4Innovations.

V rámci projektu je rovněž podporován kvalitní výzkum široké akademické komunity v České republice a rozšíření stávajících výzkumných aktivit v IT4Innovations. Vlastní výzkum je pro infrastrukturu IT4Innovations důležitým zdrojem expertízy v oblasti HPC, která se promítá do služeb, jež infrastruktura poskytuje svým uživatelům. Z toho důvodu byl v rámci projektu pořízen také nový software, který pomůže jak výzkumným pracovníkům či IT specialistům IT4Innovations, tak i uživatelům výzkumné infrastruktury. Přinášíme přehled pořízeného software a jeho hlavní přednosti.

ALLINEA FORGE

Skládá se ze dvou nástrojů: **Allinea DDT** je komerční debugger primárně pro ladění paralelních MPI nebo OpenMP programů. Podporuje také GPU (CUDA) a akcelerátory Intel Xeon Phi. DDT poskytuje všechny standardní funkce ladění. Pro každé vlákno spuštěné jako součást programu nebo pro každý proces – i když jsou tyto procesy distribuovány do klastru pomocí Implementace MPI. **Allinea MAP** je profilem pro C / C ++ / Fortran HPC kódy. Je určen pro profilování paralelního kódu, který používá pthreads, OpenMP nebo MPI.

TOTALVIEW

Jedná se o špičkový HPC debugger pro výzkumné výpočty. Software TotalView poskytuje specializované nástroje, které jsou potřeba k rychlému ladění, analýze a škálování vysoce-výkonných počítačových aplikací (HPC). To zahrnuje vysoce dynamické, paralelní a vícejádrové aplikace, které běží na různém hardwaru – od stolních počítačů po superpočítače.

CST STUDIO SUITE

Je vysoce výkonný software pro analýzu 3D EM pro návrhování, analýzu a optimalizaci elektromagnetických (EM) komponent a systémů. CST Studio Suite se používá v předních technologických a strojírenských společnostech po celém světě, ve kterých usnadňuje kratší vývojové cykly a snižuje náklady. Simulace umožňuje použití virtuálního prototypování. Výkon zařízení lze optimalizovat, včas identifikovat a zmírnit možné problémy s dodržováním předpisů, snížit počet potřebných fyzických prototypů a minimalizovat riziko selhání testu a stažení z provozu.

MOLPRO

Softwarový balíček používaný pro přesné výpočty ab initio kvantové chemie. V programu je kladen důraz na vysoce přesné výpočty, s rozsáhlým řešením problému korelace elektronů prostřednictvím interakce s vícenásobnou konfigurací, sdruženého klastru a souvisejících metod. Integrované metody přímé korelace lokálních elektronů snižují nárůst výpočetních nákladů s molekulovou velikostí. U větších molekul pak lze provést přesné výpočty ab initio. S novými explicitně korelovanými metodami lze velmi úzce přistupovat k limitu základní sady.

Podrobnější informace o instalovaném softwaru najdete [ZDE](#)



MEDEA

Přední prostředí pro simulace materiálů na atomární úrovni. To umožňuje profesionální každodenní nasazení výpočtů atomových a nano měřítek pro materiálové inženýrství, optimalizaci materiálů a objevování materiálů. V MedeA jsou prvotřídní simulační motory integrovány do zpracovaných modulů predikce vlastností, experimentálních databází, tvůrců struktury a analytických nástrojů, vše v jednom uživatelsky přívětivém prostředí.

GAUSSIAN

Poskytuje nejmodernější elektronické strukturní programy, které používají chemici, chemičtí inženýři, biochemici, fyzici a další vědci na celém světě. Gaussian poskytuje širokou škálu nejpokročilejších dostupných modelových schopností. TCP Linda je paralelní prováděcí prostředí, které bylo použito k vytvoření paralelní verze Gaussiana pro lokální síť a některá prostředí s více procesory distribuované paměti.

PGI PROFESSIONAL EDITION

Umožňuje vývoj výkonně přenosných aplikací HPC s jednotným zdrojovým kódem napříč nepoužívanějšími paralelními procesory a systémy. Jedná se o trvalou licenci na aktuální a všechna předchozí vydání kompilátorů a nástrojů PGI Fortran, C a C++ pro vícejádrové CPU a GPID NVIDIA Tesla, včetně všech funkcí OpenACC, OpenMP a CUDA Fortran.

SCHRÖDINGER MS SUITE

Platforma, která pohání design nových materiálů v celé řadě průmyslových odvětví, včetně letectví, energie, polovodičů a elektronických displejů. Molekulární simulace může urychlit vývoj nových materiálů tím, že vám pomůže identifikovat nejslibnější struktury a složení před zahájením syntézy a testování.

INTEL PARALLEL STUDIO XE CLUSTER EDITION

Umožňuje vyvíjet vysoce výkonný paralelní kód a zrychlit pracovní vytížení napříč podnikovými, cloudovými, vysoce výkonnými počítači (HPC) a AI. Tato komplexní sada vývojových nástrojů usnadňuje vytváření a modernizaci kódu pomocí nejnovějších technik ve vektorizaci, multithreadingu, multinodové paralelizaci a optimalizaci paměti. Umožňuje vývojářům softwaru C, C++, Fortran a Python vytvářet rychlejší kód, vytvářet kód rychleji a získat prioritní podporu.

TURBOMOLE

Kolaborativní projekt vývoje softwaru, jehož cílem je poskytnout vysoce efektivní a stabilní výpočetní nástroje pro kvantové chemické simulace molekul, klastrů, periodických systémů a řešení.



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



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_013/0001791) realizovaného v rámci OP VVV.





**NOVÁ INFRASTRUKTURA PRO PROJEKT
LEXIS V IT4INNOVATIONS A LRZ**

Nová infrastruktura významně pomůže při řešení projektu LEXIS

Projekt LEXIS, koordinovaný IT4Innovations, vytváří vyspělou technologickou platformu, která využije geograficky distribuované výpočetní zdroje z existující evropské superpočítačové infrastruktury pro analytická řešení velkých datových souborů (Big Data) a rozšíří je o cloudové služby. Hlavním cílem zmíněného H2020 projektu, financovaného Evropskou unií, je využít nejmodernější prostředky pro zajištění úspěšné konvergence superpočítačových a cloudových technologií.

Konsorcium projektu LEXIS složené z významných evropských superpočítačových center, zástupců průmyslových podniků nebo poskytovatelů technologií úspěšně postupuje v řešení vytyčených výzkumných cílů v rámci projektu, především díky bezproblémové spolupráci mezi partnery a nové experimentální infrastrukturu instalované v superpočítačových centrech IT4Innovations v České republice a Leibnitz Rechenzentrum (LRZ) v Německu.

„Nejdůležitější součástí infrastruktury jsou tzv. Burst Buffer servery, jež poskytují 24 TB velmi rychlého úložiště NVMe. Nové servery rovněž obsahují procesory Intel Cascade Lake a 1 TB experimentální paměti typu NVDIMM. Zmíněné zařízení poskytuje velmi rychlé úložiště pro zpracování velkých souborů dat v cloudu a v superpočítačové infrastruktuře,“ uvádí Jan Martinovič, koor-

dinátor projektu LEXIS a vedoucí Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace v IT4Innovations.

Burst Buffer servery jsou součástí řešení implementovaného společností ATOS, která je poskytovatelem technologie a zároveň partnerem projektu. Obě superpočítačová centra, IT4Innovations a LRZ, nainstalovaly dva Burst Buffer servery. Jeden ze serverů v IT4Innovations je navíc vybaven akcelerační kartou Bittware 520N, jež obsahuje FPGA Intel Stratix 10. Karta bude využita například pro on-line kompresi, zrychlení výpočetně náročných úkolů a zpracování objemných datových toků.

IT4Innovations také získalo a nasadilo do provozu experimentální cloudovou infrastrukturu, která se skládá z CEPH úložiště s kapacitou 120 TB, 6 virtualizačních uzlů, jež dohromady poskytují 240 jader procesoru a 1,2 TB RAM. Infrastruktura je propojena 100 Gbit/s Ethernet sítí postavené na technologii firmy Mellanox. Virtualizační infrastruktura bude využita pro provoz cloudového software OpenStack. Nová infrastruktura bude využita pro provoz experimentální orchestrační platformy vyvíjené v rámci projektu LEXIS. Platforma bude využívat software Ystia Orchestrator od společnosti ATOS, což usnadňuje a zefektivňuje zpracování komplexních vědeckých workflow v platformě LEXIS.



LEXIS
PROJECT

[Více o projektu LEXIS ZDE](#)



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

