

# VÝZKUM V IT4INNOVATIONS

Naše superpočítače pomáhají vědě, průmyslu a společnosti

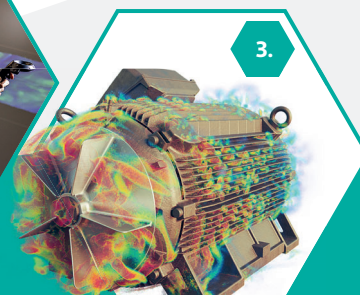


**IT4Innovations národní superpočítačové centrum** při VŠB – Technické univerzitě Ostrava je předním výzkumným, vývojovým a inovačním centrem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC), datových analýz (HPDA), kvantového počítání (QC), umělé inteligence (AI) a jejich aplikací do dalších vědeckých, průmyslových i společenských oborů, které provozuje nejvýkonnější superpočítačové systémy v České republice. IT4Innovations společně s e-infrastrukturami CESNET a CERIT-SC tvoří strategickou výzkumnou infrastrukturu České republiky e-INFRA CZ.

V současné době IT4Innovations provozuje tři superpočítače: superpočítač Barbora, specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence NVIDIA DGX-2 a petascale superpočítač Karolina, který dosahuje teoretického výpočetního výkonu 15,7 PFlop/s.

České výzkumné komunity mají od konce roku 2021 přístup také k superpočítači LUMI, a to díky členství IT4Innovations ve stejnojmenném konsorciu. LUMI je se špičkovým teoretickým výkonem 580+ PFlop/s nejvýkonnějším evropským superpočítačem a nachází se ve finském Kajaani. IT4Innovations se podílí rovněž na jeho provozování.

## LABORATOŘE



**1. Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace** se specializuje na pokročilé datové analýzy, výzkum a vývoj v oblasti co-designu HPC, HPDA a cloud technologií se zaměřením na podporu průmyslu a společnosti, programové modely pro HPDA, umělou inteligenci, modelování, simulace a aplikace dynamických systémů.

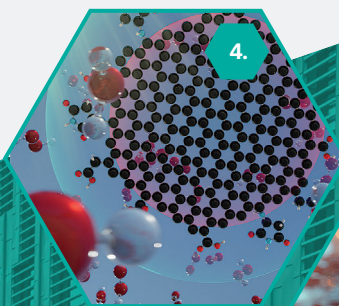
**2. Laboratoř pro výzkum infrastruktury** se věnuje vývoji a akceleraci paralelních aplikací, analýzu kódu, optimalizaci výkonu a škálovatelnosti a energetické spotřeby HPC aplikací, rozvoj služeb pro uživatele infrastruktury, zpracování medicínských dat, vizualizaci vědeckých dat, virtuální a rozšířenou realitu.

**3. Laboratoř vývoje paralelních algoritmů** je zaměřena primárně na podporu průmyslu. Nabízí kvalitní aplikovaný výzkum v oblasti vývoje škálovatelných algoritmů a HPC knihoven, nume-

rické modelování a simulace, a nasazení umělé inteligence v inženýrství.

**4. Laboratoř modelování pro nanotechnologie** je zaměřena na design, počítačové modelování, přípravu a experimentální charakterizaci v oblasti pokročilých nanomateriálů a nanotechnologií. Dále se věnuje vývoji speciálních povrchů pro nanooptiku a disponuje nejmodernějším experimentálním vybavením pro studium nanosystémů.

**5. Laboratoř kvantových výpočtů** se zabývá vývojem nových algoritmů pro kvantové počítače a simulátory včetně jejich aplikací do praxe, korekci kvantových chyb, výzkumu v oblasti kvantových technologií, komunikace, kryptografie, optimalizace a strojového učení.



### CERTIFIKACE

- ISO 9001 Systém řízení kvality
- ISO 27001 Systémy managementu bezpečnosti informací

### NÁRODNÍ CENTRUM KOMPETENCE PRO HPC

Referenční a jednotné kontaktní a koordinační místo v ČR pro vysoce výkonné počítání (HPC) a datovou analýzu (HPDA).

[www.eurocc-czechia.cz](http://www.eurocc-czechia.cz)

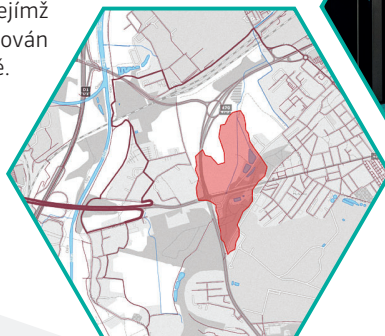
### EVROPSKÝ DIGITÁLNÍ INOVAČNÍ HUB OSTRAVA

Podpora zavádění a využívání digitálních technologií primárně v malých a středních podnicích.

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

Stěžejními tématy výzkumu IT4Innovations jsou zpracování a analýza rozsáhlých dat, strojové učení, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů a algoritmů pro kvantové počítače a simulátory, řešení náročných inženýrských úloh, pokročilá vizualizace, virtuální realita, modelování pro nanotechnologie a vývoj nových materiálů.

V roce 2023 podepsalo IT4Innovations s EuroHPC JU jako vedoucí konsorcia LUMI-Q smlouvu o hostování, na jejímž základě bude v IT4Innovations instalován a provozován jeden ze šesti kvantových počítačů EuroHPC v Evropě.



## SUPERPOČÍTAČE

	<b>NVIDIA DGX-2</b>	<b>Barbora</b>	<b>Karolína</b>	<b>LUMI</b>
Uvedení do provozu	jaro 2019	podzim 2019	léto 2021	podzim 2022
Teoretický výkon	130 TFlop/s	849 TFlop/s	15,7 PFlop/s	580+ PFlop/s
Výpočetní uzly	1	201	831	5 042
Akcelerátory celkem	16x NVIDIA Tesla V100	32x NVIDIA Tesla V100	576x NVIDIA Tesla A100 2x NVIDIA RTX 6000	11 912x AMD Instinct MI250X 8x NVIDIA A40
CPU jader celkem	48	7 232	106 880	454 784

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

### IT4INNOVATIONS JE ČLEMEM:

- BDVA (Big Data Value Association)
- EUDAT CDI (EUDAT Collaborative Data Infrastructure)
- EuroHPC Joint Undertaking
- ETP4HPC (European Technology Platform in the area of High-Performance Computing)
- PRACE (Partnership for Research and Advanced Computing in Europe)
- EOSC (European Open Science Cloud)
- LUMI (Large Unified Modern Infrastructure)
- iRODS (Integrated Rule-Oriented Data System)

### VZDĚLÁVACÍ AKTIVITY

- Ročně 25 kurzů, workshopů, konferencí
- EUMaster4HPC



EuroHPC  
Joint Undertaking

iRODS



LUMI

# VYBRANÉ PROJEKTY

## **AVITHRAPID (Antiviral Therapeutics for Rapid Response Against Pandemic Infectious Diseases)**

Cílem projektu je podpořit hledání nových širokospektrálních antivirotických sloučenin rozvíjením různých metod. Výsledkem činnosti bude vytvoření pipeline pro vývoj nových léků v rané fázi, kterou bude možné využít k rychlé identifikaci a vývoji nových antivirotických sloučenin proti nově se objevujícím nemocem.

## **BioDT Biodiversity Digital Twin for Advanced Modelling, Simulation and Prediction Capabilities) [www.biodt.eu](http://www.biodt.eu)**

Cílem projektu je posunout současné hranice prediktivního chápání dynamiky biodiverzity vývojem digitálního dvojčete, které poskytuje pokročilé možnosti modelování, simulace a predikce. Díky novému využití stávajících technologií a dat dostupných v příslušných výzkumných infrastrukturách bude projekt schopen přesněji modelovat interakci mezi druhy a jejich prostředím.

## **DTO-BioFlow (Integration of biodiversity monitoring data into the Digital Twin Ocean) [dto-bioflow.eu](http://dto-bioflow.eu)**

Projekt poskytne inovativní a udržitelná řešení pro zpřístupnění dříve nedostupných či obtížně přístupných dat z oblasti biodiverzity. Kromě toho se zaměří na vývoj efektivních a škálovatelných technologií pro monitorování druhů ve velkém měřítku.

## **EPICURE (High-level specialized application support service in High-Performance Computing)**

Týmy aplikační podpory budou v rámci projektu poskytovat služby zaměřené zejména na přenos aplikací, optimalizaci a provádění klíčových aplikací pro vybraný počet projektů ale i na organizaci vzdělávacích akcí a workshopů v rámci významných mezinárodních HPC akcí. Také bude vytvořeno jednotné kontaktní místo umožňující uživatelům HPC získat informace o systémech, jejich architektuře, přístupových mechanismech a dostupných podpůrných službách.

## **EUPEX (European Pilot for Exascale) [www.eupex.eu](http://www.eupex.eu)**

Konsorcium projektu si klade za cíl navrhnout, vybudovat a ověřit první platformu EU pro HPC, která pokrývá celé spektrum požadovaných technologií s evropskými aktivy: od architektury, procesoru, systémového softwaru, vývojových nástrojů až po aplikace. Z vědeckého hlediska je EUPEX prostředkem k přípravě komunit pro zpracování HPC, AI a Big Data na nadcházející evropské systémy a technologie Exascale.

## **EUROCC2 (National Competence Centres in the Framework of EuroHPC) [www.eurocc-czechia.cz/en](http://www.eurocc-czechia.cz/en)**

Posláním Národního centra kompetence pro HPC (NCK) je nabídnout široké portfolio služeb. V současné době nabízí kurzy, webináře nebo workshopy v relevantních oblastech. K poskytovaným službám dále patří konzultační činnost, návrh a implementace pilotních HPC řešení, či migrace existujících řešení. Vedle toho zprostředkovává i partnerství mezi akademickou sférou, státním a soukromým sektorem.

## **EXA4MIND (EXtreme Analytics for MINing Data) [www.exa4mind.eu](http://www.exa4mind.eu)**

Projekt EXA4MIND vytvoří platformu pro extrémně objemná data, která propojí datová úložiště a superpočítače zavedením nových metod auto-

matické správy dat a jejich efektivního přenosu a ukládání. Jádrem projektu jsou čtyři aplikace z oblasti molekulární dynamiky, pokročilých asistenčních systémů pro řidiče, inteligentního zemědělství/vinařství a velkých dat ve zdravotnictví a společnosti.

## **FALCON (Foreseeing the next generation of Aircraft: hybrid approach using Lattice-boltzmann, experiments and modelling to optimize fluid/structure interactions)**

Ambicí projektu je zvýšit konkurenceschopnost evropského leteckého průmyslu zaměřením se při vývoji na jevy interakce tekutin s konstrukcí letadla (FSI) s cílem zlepšit tak aerodynamické vlastnosti letadel. Konkrétně se projekt zaměřuje na vývoj vysoce výkonných, prediktivních a multidisciplinárních nástrojů pro FSI v letectví s cílem snížit aeroakustické a aeroelastické nestability pomocí vícekritériální optimalizace na datech s různým rozlišením.

## **MAX (MATERIALS design at the eXascale) [www.max-centre.eu](http://www.max-centre.eu)**

Materiálové simulace jsou jednou z nejintenzivnějších a nejrychleji rostoucích oblastí pro vysoce výkonné počítání na celém světě. Centrum excellence MaX se zaměří na tyto vlajkové kódy, aby řešil výzvy a využil příležitosti, které vyplývají z budoucích exascale a post-exascale architektur, a aby nabídl cesty k objevům a inovacím sloužícím jak vědeckým, tak průmyslovým aplikacím.

## **OpenWebSearch.EU (Piloting a Cooperative Open Web Search Infrastructure to Support Europe's Digital Sovereignty) [www.openwebsearch.eu](http://www.openwebsearch.eu)**

Cílem projektu je vytvořit otevřenou evropskou infrastrukturu pro webové vyhledávání. Během tří let výzkumníci vybudují jádro evropského otevřeného webového indexu jako základ pro nové internetové vyhledávání v Evropě. Projekt položí i základy otevřené a rozšiřitelné evropské infrastruktury pro otevřené vyhledávání a analýzu webu, založené na evropských hodnotách, zásadách, právních předpisech a standardech.

## **POP3 (Performance Optimisation and Productivity 3) [www.pop-coe.eu](http://www.pop-coe.eu)**

Centrum excellence pro optimalizaci výkonu a produktivity pomáhá vývojářům a uživatelům HPC aplikací ve vědeckých i průmyslových oblastech. Ve třetí fázi se zaměří na vlajkové lodě evropských HPC aplikací vyvíjené v dalších centrech excellence, zároveň bude i nadále poskytovat služby všem pravidelným uživatelům výpočetních prostředků i malým a středním podnikům.

## **SPACE (Scalable Parallel and distributed Astro-physical Codes for Exascale) [www.space-coe.eu](http://www.space-coe.eu)**

V astrofyzice a kosmologii jsou numerické simulace využívající High-Performance Computing (HPC) klíčovými nástroji pro vědecké objevy. Cílem centra excellence SPACE je přepracovat vybrané kódy, aby byly schopny plně využít nových výpočetních architektur a používat nové programovací metody, softwarová řešení a HPC knihovny.