

Přehled roku 2023

Podporujeme inovace
s pomocí superpočítačů
a kvantového počítače.

Obsah

4	ÚVODNÍ SLOVO ŘEDITELE IT4INNOVATIONS
8	PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS
10	HISTORIE
11	MISE, VIZE A ČLENSTVÍ
12	ORGANIZAČNÍ STRUKTURA
16	VÝZNAMNÉ UDÁLOSTI
20	FINANČNÍ PŘEHLED
21	ZDROJE FINANCOVÁNÍ
24	SOUHRNNÝ VÝČET PROJEKTŮ
26	SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY
28	TECHNICKÉ PARAMETRY SUPERPOČÍTAČŮ
32	PŘIDĚLOVÁNÍ VÝPOČETNÍHO ČASU
38	VÝZKUM A VÝVOJ
40	PŘEHLED VÝSLEDKŮ VÝZKUMU A VÝVOJE V ROCE 2023
50	LABORATOŘ PRO NÁROČNÉ DATOVÉ ANALÝZY A SIMULACE
51	LABORATOŘ PRO VÝZKUM INFRASTRUKTURY
52	LABORATOŘ VÝVOJE PARALELNÍCH ALGORITMŮ
53	LABORATOŘ MODELOVÁNÍ PRO NANOTECHNOLOGIE
54	LABORATOŘ PRO BIG DATA ANALÝZY
56	VZDĚLÁVACÍ A ŠKOLICÍ AKTIVITY
58	SEZNAM PROJEKTŮ
58	NÁRODNÍ PROJEKTY
58	Projekty v oblasti superpočítačových služeb
59	Projekty v oblasti vědy a výzkumu
65	Projekty VŠB-TUO, na kterých se podílíme
67	MEZINÁRODNÍ PROJEKTY
67	Projekty v oblasti superpočítačových služeb
67	Projekty v oblasti vědy a výzkumu
73	Projekty v oblasti vzdělávání
74	SEZNAM ZKRATEK

Úvodní slovo ředitele IT4Innovations

Vážení přátelé a partneři IT4Innovations, s velkým potěšením vám předkládám publikaci Přehled za rok 2023, ve které se ohlížíme za našimi klíčovými úspěchy a milníky, stejně jako za výsledky činnosti a hospodaření, kterých jsme v tomto roce dosáhli.

Na úvod si dovoluji shrnout novinky v oblasti naší infrastruktury. V loňském roce jsme udělali významný krok vpřed v oblasti kvantových výpočtů. V červnu jsme podepsali dohodu o pořízení a provozování kvantového počítače mezinárodního konsorcia LUMI-Q s celoevropským společným podnikem EuroHPC. Tento kvantový počítač bude instalován přímo v IT4Innovations, což představuje zásadní příležitost pro posílení naší výzkumné kapacity a inovací v oblasti kvantových technologií. V souvislosti s tímto byla zahájena transformace Laboratoře pro big data analýzy na novou výzkumnou laboratoř věnující se právě kvantovým výpočtům.

Na datovém sále byly instalovány a zprovozněny pro všechny uživatele e-INFRA CZ komplementární systémy sestávající z několika hardwarových platforem. Tyto systémy poskytují přístup k nastupujícím, netradičním nebo úzce specializovaným hardwarovým architektuрам. Velmi významným milníkem roku 2023 byla plná akceptace nejvýkonnějšího evropského superpočítače LUMI, instalovaného ve finském Kajaani, na jehož pořízení, budování i provozu se podílí i Česká republika prostřednictvím IT4Innovations. Česká vědecká komunita má tak díky našemu členství v konsorciu LUMI přístup k výpočetním zdrojům této evropsky i celosvětově

jedinečné superpočítačové infrastruktury. V neposlední řadě jsme úspěšně dokončili na našich superpočítačích migraci na nový systém pro správu úloh Slurm, který je v dnešní době v oblasti superpočítačů nejrozšířenější a představuje uživatelský standard.

Rok 2023 byl také rokem významných vědeckých úspěchů. Započal projekt EXA4MIND, který IT4Innovations koordinuje a jehož cílem je vytvořit jedinečnou softwarovou platformu pro zpracování extrémně objemných dat. Stali jsme se partnery Center excellence MaX a SPACE v oblastech materiálového výzkumu, respektive astrofyziky, a zapojili jsme se do nových projektů EOSC CZ, AIOOPEN a DTO-BioFlow. Celkem jsme se podíleli na 21 mezinárodních projektech. V červnu jsme se stali členy konsorcia iRODS, které sdružuje výzkumné organizace, univerzity, soukromé firmy i veřejné instituce z celého světa, zajišťující vývoj a udržitelnost stejnojmenného softwaru pro distribuované ukládání, přenos a správu dat. V květnu jsme zahájili projekt zaměřený na experimentální a teoretické studie luminoforů s chirálními uhlíkovými tečkami pod záštitou programu Moravskoslezského kraje „Global Experts“. Vyzdvihl bych rovněž výzkumy našich kolegů, které byly otištěny ve významných světových časopisech – hned dva v Nature Communications, a titulní stránka s výsledkem našeho výzkumu se objevila v The Journal of Physical Chemistry C.

Intenzivně se rovněž věnujeme vytváření příznivých podmínek pro využívání superpočítačů malými a středními podniky či start-upy. Na začátku roku 2023 odstartoval svou činnost Evropský digitální inovační hub Ostrava, jehož cílem je podporovat zavádění a využívání digitálních technologií primárně právě v malých a středních firmách a veřejných organizacích. Do druhé fáze existence vstoupilo Národní centrum kompetence pro HPC, jehož služby v České republice zajišťuje právě IT4Innovations.

Úspěchy našich kolegů jsou pro nás vždy zdrojem velké hrdosti. Pierre Koleják získal ocenění Talent roku, které uděluje město Ostrava výjimečným studentům. Radek Halfar obdržel za svou disertační práci „Dynamika modelů srdeční elektrofyzologie“ 1. místo v kategorii „Informační technologie a elektrotechnika“ soutěže VŠB-TUO a 7. místo v soutěži Ceny Wernera von Siemense pro rok 2023.

Na závěr bych rád poděkoval všem zaměstnancům IT4Innovations za jejich tvrdou práci a oddanost, díky které jsme dosáhli těchto skvělých výsledků. Děkuji také našim partnerům a podporovatelům za jejich nepřetržitou podporu. Společně se těšíme na další rok plný excelentních výsledků, inovací a úspěchů.



Vít Vondrák

ředitel IT4Innovations národního
superpočítačového centra



↔ Budova IT4Innovations byla slavnostně otevřena v roce 2014.

1

Představení IT4Innovations

IT4Innovations národní superpočítačové centrum (IT4Innovations) je vysokoškolským ústavem VŠB – Technické univerzity Ostrava. Jedná se o přední výzkumné, vývojové a inovační centrum v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC), datových analýz (HPDA), kvantového počítání (QC), a umělé inteligence (AI) a jejich aplikací do dalších vědeckých, průmyslových i společenských oborů. IT4Innovations poskytuje od roku 2013 nejmodernější superpočítačové technologie a služby jak českým, tak i zahraničním výzkumným týmům z akademické i soukromé sféry za účelem zvýšení konkurenceschopnosti a inovativnosti vědy a průmyslu. IT4Innovations společně s CESNET a CERIT-SC tvoří [strategickou výzkumnou infrastrukturu České republiky e-INFRA CZ](#). Tato infrastruktura je vedena v Cestovní mapě velkých výzkumných infrastruktur České republiky pro výzkum, experimentální vývoj a inovace, kterou sestavuje Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (MŠMT).

V současné době IT4Innovations provozuje dva superpočítače: [Karolina](#) (15,7 PFlop/s, instalovaný v létě 2021) a [Barbora](#) (849 TFlop/s, instalovaný na podzim 2019), a dále specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence [NVIDIA DGX-2](#) (2 PFlop/s pro AI, instalovaný na jaře 2019). Prvními superpočítači instalovanými v IT4Innovations byly Anselm (94 TFlop/s, instalovaný v létě 2013) a Salomon (2 PFlop/s, instalovaný v létě 2015), jejichž provoz byl ukončen v roce 2021. IT4Innovations se jakožto člen konsorcia LUMI podílí také na provozu superpočítače LUMI, pátého nejvýkonnějšího superpočítače na světě a nejvýkonnějšího superpočítače v Evropě instalovaného ve finském Kajaani. Díky tomu má česká výzkumná komunita přístup i k tomuto superpočítači (531,5 PFlop/s).

Na datovém sále IT4Innovations se nachází také [komplementární systémy](#) sestávající z několika hardwarových platform. Tyto systémy poskytují uživatelům přístup k nastupujícím, netradičním nebo úzce specializovaným hardwarovým architekturám.

V roce 2024 bude v IT4Innovations instalován také první český [kvantový počítač](#) pořizovaný v rámci evropského konsorcia LUMI-Q. Kvantový počítač bude založený na supravodivých qubitech v topologii ve tvaru hvězdy a bude obsahovat nejméně 20 qubitů. Využívat jej bude moci celá uživatelská základna EuroHPC JU.

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.

Výzkumné aktivity IT4Innovations byly v roce 2023 realizovány v pěti laboratořích:

- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace,
- Laboratoř pro výzkum infrastruktury,
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů,
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie,
- Laboratoř pro big data analýzy.

IT4Innovations je [Národním centrem kompetence pro HPC](#), členem [Center excellence MaX](#), [SPACE](#) a [POP3](#) a partnerem [více než 10 dalších mezinárodních projektů](#) programu Horizont 2020, Horizont Evropa a Digitální Evropa, přičemž projekty [EXA4MIND](#) a [EDIH Ostrava](#) také koordinuje.

IT4Innovations je velmi aktivní ve spolupráci s průmyslem. V roce 2023 zahájil svou činnost [Evropský digitální inovační hub Ostrava](#) (EDIH Ostrava), který vznikl spojením aktivit IT4Innovations a Fakulty elektrotechniky a informatiky, které jsou součástí VŠB – Technické univerzity Ostrava, a Moravskoslezského inovačního centra Ostrava. EDIH Ostrava je součástí sítě Evropských digitálních inovačních hubů, které podporují zavádění a využívání digitálních technologií primárně v malých a středních firmách s cílem podpory jejich konkurenceschopnosti.

IT4Innovations nabízí také širokou škálu [odborných školení](#) zaměřených na HPC, HPDA, AI, QC a získání znalostí potřebných k efektivnímu využívání superpočítačové infrastruktury. Ve zmíněných oblastech se IT4Innovations taktéž podílí na vzdělávání studentů zejména v rámci magisterského studijního programu [Výpočetní a aplikovaná matematika](#) a doktorských studijních programech [Výpočetní vědy a Informatika a výpočetní vědy](#) Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO. Na stejné fakultě studovali v roce 2023 první studenti nový předmět [Úvod do kvantového počítání](#), který připravili odborníci z IT4Innovations. IT4Innovations je také členem konsorcia [EUMaster4HPC](#), které realizuje stejnojmenný celoevropský magisterský studijní program zaměřený na vysoce výkonné počítání.

Historie

- 2011** → založení IT4Innovations
→ členství v PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)
- 2013** → spuštění superpočítače Anselm
- 2014** → otevření budovy IT4Innovations
- 2015** → zprovoznění superpočítače Salomon
- 2016** → členství v ETP4HPC (European Technology Platform for High-Performance Computing)
- 2018** → Česká republika se připojila k EuroHPC JU, na jehož aktivitách se IT4Innovations významně podílí
→ IT4Innovations se stává součástí H2020 Centra excellence POP2
- 2019** → spuštění superpočítačů Barbora a NVIDIA DGX-2
→ členství v BDVA (Big Data Value Association) a EUDAT CDI
→ vznik e-INFRA CZ
→ start projektu LEXIS, jehož bylo IT4Innovations koordinátorem
- 2020** → vznik Digitálního inovačního hubu Ostrava
→ IT4Innovations se stává Národním centrem kompetence pro HPC
- 2021** → spuštění superpočítače Karolína
→ ukončení provozu superpočítačů Anselm a Salomon
→ členství v EOSC Association
- 2022** → vznik Evropského digitálního inovačního hubu Ostrava (EDIH Ostrava)
→ schválen projekt konsorcia LUMI-Q na umístění kvantového počítače v IT4Innovations
- 2023** → IT4Innovations členem konsorcia iRODS
→ dokončení instalace komplementárních systémů
→ start projektu EXA4MIND, který je koordinován IT4Innovations
→ IT4Innovations součástí Center excellence MaX a SPACE

Mise, vize, hodnoty a členství

Mise Realizovat excelentní výzkum v oblasti velmi náročných výpočtů a datových analýz a provozovat přední národní superpočítačovou infrastrukturu, zprostředkovávat její efektivní využití za účelem zvýšení konkurenceschopnosti a inovativnosti české vědy a průmyslu.

Vize IT4Innovations chce být předním superpočítačovým centrem, které poskytuje profesionální služby a realizuje excelentní výzkum v oblasti velmi náročných výpočtů a zpracování rozsáhlých dat ku prospěchu vědy, průmyslu i celé společnosti.

Členství IT4Innovations se významně podílí na aktivitách celoevropského společného podniku EuroHPC a je členem v klíčových evropských infrastrukturách, iniciativách a sdruženích v oblasti HPC a HPDA. Jedná se například o následující:

- BDVA – Big Data Value Association
- EOSC – European Open Science Cloud
- ETP4HPC – European Technology Platform for High-Performance Computing
- EUDAT CDI – EUDAT Collaborative Data Infrastructure
- LUMI – Large Unified Modern Infrastructure
- LUMI-Q – Large Unified Modern Infrastructure for Quantum Computing
- iRODS – Integrated Rule-Oriented Data System
- PRACE – Partnership for Advanced Computing in Europe

Organizační struktura

Organizační struktura
IT4Innovations

Vědecká rada | Ředitel | doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Vědecký ředitel | prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace | Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Laboratoř pro výzkum infrastruktury | doc. Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů | Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie | prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
- Laboratoř pro big data analýzy | prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
- Oddělení školení a vzdělávání | Ing. Karina Pešatová, MBA

Ředitel superpočítačových služeb | Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

- Oddělení provozu a správy HPC | Ing. et Ing. Radovan Pasek
- Oddělení uživatelské podpory | Ing. Petra Lyčková Navrátilová

- Oddělení komunikace | Mgr. Zuzana Červenková
- Oddělení veřejných zakázek a právních služeb | Ing. Jan Juřena
- Ekonomické oddělení | Ing. Petr Válek
- Oddělení bezpečnosti, provozu a správy budov | Ing. Helena Starková
- Oddělení rozvoje | Mgr. Martin Duda

Vědecká rada
IT4Innovations

Předseda | doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Členové interní

- prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.
- Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.
- Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- doc. Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
- Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
- prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
- prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.

Členové externí

- prof. Mgr. Jiří Damborský, Dr. | Loschmidtovy laboratoře Masarykovy univerzity
- doc. Ing. Jiří Jaroš, Ph.D. | Fakulta informačních technologií Vysokého učení technického v Brně
- Ing. Jakub Šístek, Ph.D. | Matematický ústav Akademie věd České republiky
- doc. Ing. Pavel Jelínek, Ph.D. | Fyzikální ústav Akademie věd České republiky
- prof. RNDr. Jaroslav Pokorný, CSc. | Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

Zaměstnanci
IT4Innovations

Počet zaměstnanců IT4Innovations po přepočtu na ekvivalent plného pracovního úvazku (FTE) činil k 31. 12. 2023 celkem 159,32 FTE, z toho tvořilo:

25,7 % Management a administrativa

12,1 % Superpočítačové služby

62,2 % Výzkum a vývoj

- 43,2 % Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
- 16,4 % Laboratoř modelování pro nanotechnologie
- 14,9 % Laboratoř pro výzkum infrastruktury
- 22,5 % Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
- 3,0 % Laboratoř pro big data analýzy



KAROLINA

↔ V roce 2023 provozovalo IT4Innovations dva superpočítače: Karolina a Barbora.

2

Významné události

Leden

→ Start tříletého projektu **EuroCC 2**, který zajišťuje pokračování **Národního centra kompetence pro HPC** (NCK), jímž je IT4Innovations. Cílem NCK je primárně nabídnout široké portfolio služeb v oblasti HPC, ale také podpořit spolupráci na celoevropské úrovni, posílit technologickou nezávislost a konkurenceschopnost českých firem.

→ Titulní stránku magazínu **The Journal of Physical Chemistry B** zdobí obrázek z výzkumu lipidových nanočástic vědců z CATRIN a IT4Innovations.

→ Na **vývoji nového nanomateriálu**, který okamžitě odhalí antibiotika ve vodě, se podílel Michal Otyepka.

→ IT4Innovations je členem **Evropského centra excelence SPACE** (Scalable Parallel Astrophysical Codes for Exascale), jehož cílem je připravit aplikace, které se používají ve výzkumu astrofyziky a kosmologie, na éru exascale.

→ Zahájen projekt EXA4MIND, jehož cílem je vytvořit platformu pro extrémně objemná data, která propojí datová úložiště a superpočítače. Projekt koordinuje IT4Innovations.

→ IT4Innovations se stalo partnerem **Evropského centra excelence MaX** (Materials design at the eXascale), které umožní modelování, simulace, objevování a navrhování materiálů na pomezí současných a budoucích technologií pro vysoce výkonné počítání (HPC) a technologií pro analýzu dat.

→ Svou činnost odstartoval **Evropský digitální inovační hub Ostrava**, jehož cílem je podporovat zavádění a využívání digitálních technologií primárně v malých a středních firmách, a také ve veřejných organizacích.

→ Své aktivity v České republice zahájil projekt **EOSC-CZ** (European Open Science Cloud), který propojí existující vědecké komunity a vytvoří zázemí pro systematickou práci, ukládání a sdílení dat. To usnadní a urychlí vědcům a vědeckým organizacím přístup k výzkumným datům.

Únor

→ Nejvýkonnější evropský superpočítač **LUMI** byl plně akceptován. Česká vědecká komunita má možnost žádat o výpočetní zdroje na LUMI v rámci veřejných grantových soutěží, které IT4Innovations vyhlašuje třikrát ročně, a to zcela zdarma. LUMI je instalován ve finském Kajaani.

Březen

→ Jan Martinovič převzal **ocenění za projekt EXA4MIND** na slavnostním zasedání Vědecké rady VŠB-TUO.

Duben

→ Vědci z IT4Innovations vyvinuli **unikátní technologii**, která umožní využít odpad z výroby bionafty a přeměnit jej na užitečné produkty, a zvýšit tak účinnost stávajících biopaliv. Výsledky výzkumu zveřejnil časopis Nature Communications.

Květen

→ Zahájení projektu Experimentální a teoretické studie luminoforů s chirálními uhlíkovými tečkami emitující blízké infračervené záření pod záštitou programu Moravskoslezského kraje „Global Experts“. Cílem programu je na univerzity v Moravskoslezském kraji přilákat špičkové světové vědce. Do IT4Innovations přichází profesor Andrey Rogach.

→ Nejnovější výzkumné výsledky iniciativy **Cell Tracking Challenge**, do níž je zapojeno i IT4Innovations, byly publikovány v prestižním časopise Nature Methods.

→ Podepsána dohoda o pořízení a provozování kvantového počítače mezinárodního konsorcia LUMI-Q s celoevropským společným podnikem EuroHPC. Kvantový počítač bude instalován v IT4Innovations.

→ IT4Innovations se stalo členem [konsorcia iRODS](#). Konsorcium sdružuje podniky, výzkumné organizace, univerzity a vládní agentury z celého světa, aby zajistilo udržitelnost softwaru iRODS (Integrated Rule-Oriented Data System) jako řešení pro distribuované ukládání, přenos a správu dat.

→ Voicebot, který se aktivuje při extrémním přetížení tísňových linek a na jehož vývoji se podíleli vědci z IT4Innovations, vyhrál cenu evropské iniciativy podporující využití AI ve veřejné správě [DT4REGIONS](#) za nejnovativnější řešení.

→ Náš kolega Pierre Koleják získal ocenění [Talent roku](#), které uděluje město Ostrava výjimečným studentům.

→ Bakalářská práce „Vizualizace vývoje dopravního toku v čase“ Pavlína Smolkové pod vedením Kateřiny Slaninové z IT4Innovations získala [ocenění za vynikající zpracování](#). Práce se zaměřuje na vytváření videa zobrazujícího směr a intenzitu dopravy na jednotlivých úsecích dopravní sítě.

→ Titulní stranu časopisu [The Journal of Physical Chemistry C](#) zdobí obrázek z výzkumu popisujícího tvorbu amidové vazby na povrchu grafenu, na kterém spolupracovali vědci z CATRIN, Akademie věd ČR, Technische Universität Dresden, Technische Universität München, Indian Institute Of Technology – Jammu a VŠB-TUO.

→ Společný výzkum Akademie věd ČR, Univerzity Palackého v Olomouci a IT4Innovations byl publikován v [Nature Communications](#). Vědci se zabývali vizualizací π -děr v molekulách pomocí Kelvinovy sondy silové mikroskopie, pro které využili i superpočítače IT4Innovations. K autorům výzkumu patří i profesor Pavel Hobza a Maximilián Lamanec z IT4Innovations.

→ Evropská kosmická agentura (ESA) podpořila projekt [AIOPEN](#). Na platformě budou během projektu realizovány dvě případové studie, přičemž za řešení studie Detekce urbanistických změn pomocí tzv. transformer architektury je zodpovědné IT4Innovations.

→ Odstartoval projekt [DTO-BioFLOW](#) (Integration of biodiversity monitoring data into the Digital Twin Ocean). Do řešení projektu je zapojeno 30 partnerů, včetně IT4Innovations.

→ Finalizována migrace na nový systém pro správu úloh na superpočítačích Slurm.

→ Jiří Tomčala získal certifikát [Quantum Excellence](#) udělovaný společností IBM.

→ Novou „zelenou“ cestu pro [výrobu hematenu](#), dvoudimenzionálního materiálu odvozeného od železitého minerálu hematitu s velkým potenciálem pro využití v oblasti čisté energie a v environmentálních aplikacích, našli výzkumníci z Univerzity Palackého a VŠB-TUO v článku publikovaném v Applied Materials Today. Výzkum, na kterém se podílel i Michal Otyepka z IT4Innovations, pronikl na titulní stránku časopisu.

→ Tajemství superpočítačů odhalilo v IT4Innovations bezmála 700 návštěvníků díky celoevropské akci [Noc vědců](#).

→ Zahájeno pokračování projektu [Superheroes 4 Science](#), který se zavazuje představit mladé generaci úžasný svět vysoce výkonného a kvantového počítačů. Projekt je podpořen vládami České republiky, Polska a Slovenska prostřednictvím Mezinárodního visehradského fondu.

→ Vyšla kniha „[Scalable Algorithms for Contact Problems](#)“, jejímiž autory jsou Zdeněk Dostál, Tomáš Kozubek, Marie Sadowská a Vít Vondrák, s příspěvky od Tomáše Brzobohatého, Lubomíra Říhy, Oldřicha Vlacha a Davida Horáka.

→ Na [7. Konferenci uživatelů výpočetních zdrojů IT4Innovations](#) jsme přivítali téměř 90 účastníků.

→ V rámci spolupráce s firmou IXPERTA byl [vyvinut softwarový simulátor podmínek na železniční trati](#) pro vývoj funkční detekční jednotky pro bezpečnost vlakové dopravy.

3

Finanční přehled

Bilance hospodaření IT4Innovations

Celkové náklady IT4Innovations v roce 2023 činily **305.486.000 Kč**. Z této částky byly provozní (neinvestiční) náklady rovny 90,1 %, investiční (kapitálové) náklady tvořily 9,9 %.

Provozní náklady dosáhly v roce 2023 výše 275 milionů Kč. Jejich největší část tvořily mzdové výdaje, služby (náklady za spotřebu elektrické energie, servis provozovaných výpočetních a datových systémů a podpůrné infrastruktury, technickou a systémovou podporu atd.) a režijní výdaje.

Investiční náklady v roce 2023 dosáhly 30 milionů Kč a zahrnovaly mj. rozšíření datového úložiště PROJECT, pořízení komplementárních systémů II či modernizaci zasedacích místností.

V roce 2023 bylo dosaženo zisku před zdaněním ve výši 3.420.000 Kč.

Bilance hospodaření IT4Innovations

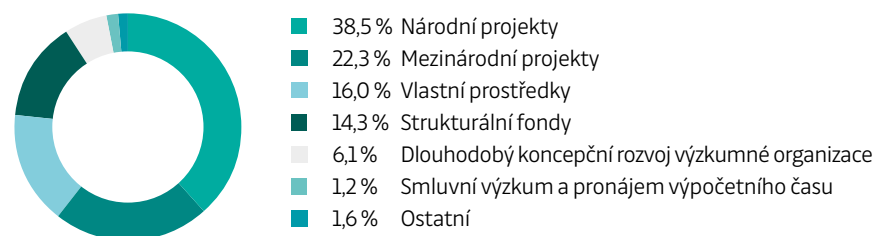
A. Celkem provozní náklady	275.297.000 Kč
Mzdové výdaje – výzkumné týmy	98.084.000 Kč
Mzdové výdaje – řízení a administrativa	40.913.000 Kč
Mzdové výdaje – superpočítačové služby	20.017.000 Kč
Služby	63.472.000 Kč
Režijní výdaje	37.489.000 Kč
Zahraniční a domácí pracovní cesty	7.443.000 Kč
Drobný dlouhodobý hmotný majetek	2.334.000 Kč
Spotřební materiál	2.195.000 Kč
Poplatky	2.246.000 Kč
Ostatní náklady	782.000 Kč
Stipendia	322.000 Kč
B. Celkem investiční náklady	30.189.000 Kč
Dlouhodobý hmotný majetek - stroje a zařízení	28.674.000 Kč
Dlouhodobý hmotný majetek - stavby	1.515.000 Kč
C. Celkem náklady (A+B)	305.486.000 Kč
D. Celkem zdroje financování	308.906.000 Kč
E. Celkem bilance (D-C)	3.420.000 Kč

Zdroje financování

V roce 2023 hospodařilo IT4Innovations se zdroji ve výši 308.906.000 Kč. Největší podíl na zdrojích financování měly národní projekty následované mezinárodními projekty. Dalšími nejvýznamnějšími zdroji financování IT4Innovations byly vlastní prostředky (fond provozních prostředků, příspěvek na vzdělávací činnost) a strukturální fondy.

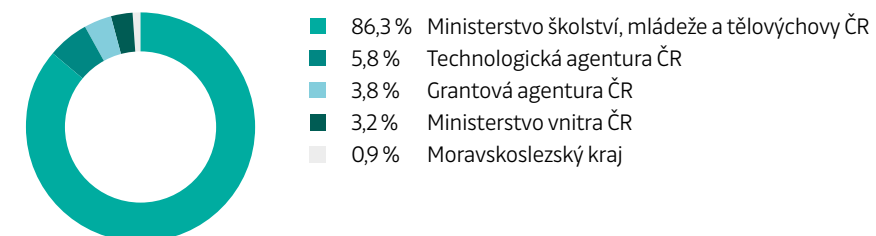
Zdroje financování nákladů ústavu

Celkem 308.906.000 Kč



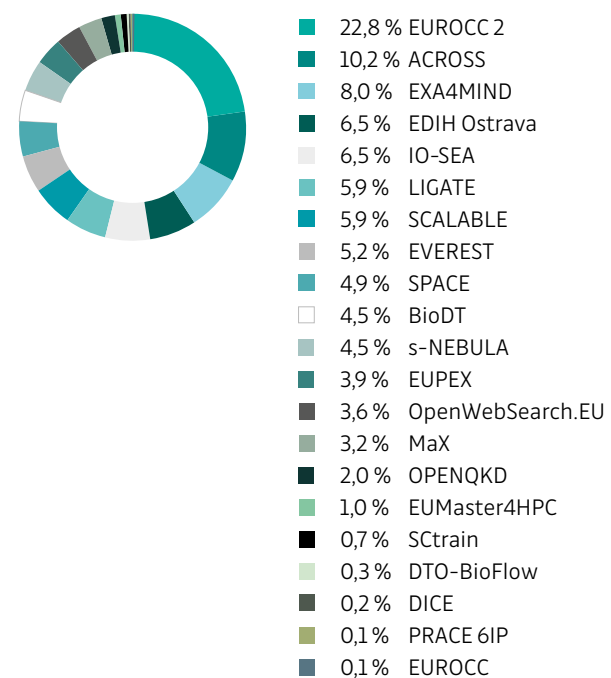
Národní projekty

Celkem 118.762.000 Kč



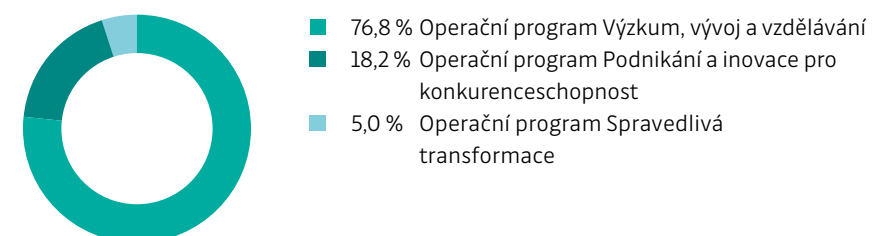
Mezinárodní projekty

Celkem 68.957.000 Kč



Evropské strukturální a investiční fondy

Celkem 44.166.000 Kč



Souhrnný výčet projektů

Národní projekty

Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Projekt velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace

- e-Infrastruktura CZ
- e-INFRA CZ: Modernizace

Projekty Operačního programu Jan Amos Komenský

- Modernizace e-INFRA CZ II

Projekty Operačního programu Jan Amos Komenský

European Open Science Cloud Czech Republic

Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

- Umělá inteligence a uvažování
- Vývoj nástroje pro zpracování a vizualizaci vědeckých dat ve VR s podporou více uživatelů
- Nové zdroje THz záření emitovaného pomocí spintronických jevů
- Vývoj výpočetních algoritmů pro řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky s využitím numerické knihovny ESPRESO

Mezinárodní spolupráce ve výzkumu a vývoji

- Vliv termoelektrických efektů na spin-orbitální torze v 2D van der Waalsových materiálech

Projekty podpořené Moravskoslezským krajem

Program Global Experts

- Experimentální a teoretické studie luminoforů s chirálními uhlíkovými tečkami emitující blízké infračervené záření

Projekty podpořené Grantovou agenturou České republiky

Mezinárodní grantové projekty hodnocené na principu LEAD Agency

- Magnetismus na rozhraní: z kvantového do reálného světa

Standardní grantové projekty

- Nekonenční supravodiče v extrémních podmínkách
- Nové termoelektrické, termovoltaiické a fononelektrické systémy pro konverzi tepla na bázi polovodičů nitridů

Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky

Program TREND

- Propojení holografické a datové bezpečnostní ochrany

Program ÉTA

- Vytvoření modelu pro hodnocení dopadů změn parametrů daňově-dávkového systému na socioekonomickou situaci rodin s dětmi v České republice

Projekty podpořené Ministerstvem průmyslu a obchodu

Projekty Operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost

- SmartFleet – software na bázi AI pro plnohodnotné využití elektromobilů v podnicích a maximalizaci jejich podílu ve vozovém parku

- Hologramy s aktivními bezpečnostními prvky
- Výzkum a vývoj aplikačního SW nástroje pro efektivní hodnocení katalytických procesů
- Rozvoj, zabezpečení a škálovatelnost cloudových služeb v oblasti digitální transformace

Projekty Operačního programu Technologie a aplikace pro konkurenceschopnost

- Spektrometry terahertzové a Ramanovy optické aktivity s rozšířenými aplikačními možnostmi

Projekty podpořené Ministerstvem vnitra České republiky

- Výzkum holistického modelu propojené kritické elektroenergetické a komunikační infrastruktury

Projekty VŠB-TUO, na kterých se podílíme

- Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí
- REFRESH – Research Excellence For REgion Sustainability and High-tech Industries
- Praktické ověření možnosti integrace umělé inteligence pro příjem tísňových volání

Mezinárodní projekty

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

- ACROSS – HPC big data artificial intelligence cross stack platform toward exascale
- DICE – Data Infrastructure Capacity for EOSC
- EUMaster4HPC – European Master for High Performance Computing
- EUPEX – European Pilot for EXascale
- EVEREST – Design Environment for Extreme-Scale big data analytics on heterogeneous platforms
- IO-SEA – IO Software for Exascale Architecture
- LIGATE – Ligand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale
- OPENQKD – Open European Quantum Key Distribution Testbed
- s-NEBULA – Novel Spin-Based Building Blocks for Advanced TeraHertz Applications
- SCALABLE – Scalable Lattice Boltzmann Leaps to Exascale

Projekty 9. rámcového programu EU pro výzkum a inovace – Horizont Evropa

- BioDT – Biodiversity Digital Twin for Advanced Modelling, Simulation and Prediction Capabilities
- DTO-BioFlow – Integration of biodiversity monitoring data into the Digital Twin Ocean
- EXA4MIND – Extreme Analytics for MINing Data spaces
- MaX – Materials design at the eXascale
- OpenWebSearch.EU – Piloting a Cooperative Open Web Search Infrastructure to Support Europe's Digital Sovereignty
- SPACE – Scalable Parallel and distributed Astrophysical Codes for Exascale

Program Digitální Evropa

- EUROCC 2 – National Competence Centres in the Framework of EuroHPC Phase 2
- EDIH Ostrava – Evropský digitální inovační hub Ostrava
- CZQCI – Czech National Quantum Communication Infrastructure

Erasmus+ projekty

- SCtrain – Supercomputing knowledge partnership

Mezinárodní visegrádský fond

- Superheroes 4 Science

4

Superpočítačové služby

IT4Innovations provozuje nejvýkonnější superpočítačové systémy v České republice, které využívají především akademická pracoviště a výzkumné instituce. Část kapacity je rovněž vyhrazena pro rozvoj spolupráce mezi akademickou sférou a průmyslovými partnery či pro samostatné využití smluvními partnery formou komerčního pronájmu.

Superpočítače

V roce 2023 provozovalo IT4Innovations dva superpočítače – **Karolina** (15,7 PFlop/s) a **Barbora** (849 TFlop/s), a dále specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence **NVIDIA DGX-2** (2 PFlop/s pro AI). Petascalový systém Karolina byl plně zprovozněn v létě 2021. Pořízen byl v rámci společného evropského podniku EuroHPC, přičemž 35 % jeho výpočetní kapacity je k dispozici uživatelům z členských zemí EuroHPC JU. Ihned po svém spuštění se zařadil mezi nejvýkonnější superpočítače v Evropě. V žebříčku TOP500, který sleduje superpočítače z hlediska jejich výkonnosti, se celosvětově umístil na 69. pozici a v Evropě obdržel 19. příčku. V žebříčku Green500 energeticky nejúčinnějších superpočítačů obsadil 8. místo a v Evropě bronzovou příčku.

Od roku 2023 je plně zprovozněn také superpočítač **LUMI**, jehož teoretický výkon dosahuje 531,5 PFlop/s. Díky členství IT4Innovations v konsorciu LUMI (Large Unified

Modern Infrastructure) tvořeném jedenácti evropskými zeměmi mohou čeští vědci počítat na jednom z nejvýkonnějších a nejmodernějších superpočítačů světa. IT4Innovations se podílí na realizaci tohoto projektu jako součást jeho řídicí struktury, poskytuje odbornou podporu uživatelům v rámci tzv. LUST (LUMI user support team), podílí se na jeho provozu či vyvíjí softwarové nástroje jako je HyperQueue, které umožňují uživatelům efektivně využívat dostupné výpočetní zdroje LUMI.

V roce 2023, kdy byl superpočítač LUMI plně zprovozněn a akceptován, získalo celkem 101 vědeckých projektů v rámci výzev IT4Innovations výpočetní zdroje LUMI. Dohromady projekty získaly téměř 1 milion uzlohodin.

Pro hodnocení využití výpočetních zdrojů IT4Innovations se opíráme o koncepci uzlohodin, jelikož výpočetní klastry i jednotlivé uzly disponují odlišnou architekturou a výkonem. Každý výpočetní systém má specifické parametry, jako jsou typy procesorů, grafických akceleratorů a další faktory, jež ovlivňují jeho výkonnost. Ačkoliv tyto uzlohodiny na výpočetních klastrech v následujícím textu sčítáme pro účely zjednodušení, nereflktují rozdílný výkon jednotlivých výpočetních uzlů.

Komplementární systémy

Nejnovejším přírůstkem v IT4Innovations jsou **komplementární systémy** sestávající z několika hardwarových platform. Tyto systémy poskytují přístup k nastupujícím, netradičním nebo úzce specializovaným hardwarovým architekturom. První dodávka byla do provozu v IT4Innovations uvedena na podzim roku 2022 a v roce 2023 byly dodány další hardwarové platformy. Uživatelům výpočetních zdrojů IT4Innovations, zejména vývojářům softwarů, nabízí možnost testovat své aplikace na hardwarech, se kterými se mohou setkat v jiných výpočetních centrech (např. EuroHPC systémy LUMI či Deucalion) nebo v připravovaných systémech, národních i zahraničních (např. JUPITER).

Datové úložiště PROJECT

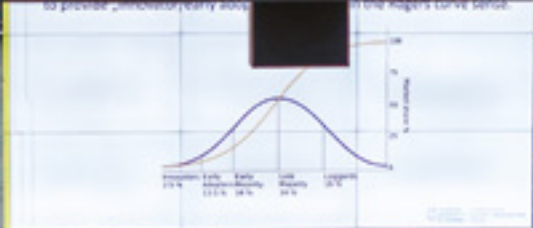
Na datovém sále IT4Innovations se nachází rovněž **velkokapacitní datové úložiště PROJECT**, které slouží pro uchování a zálohování dat, jež jsou zpracovávána nebo generována na superpočítačích v IT4Innovations. PROJECT je určen k používání pro všechny projekty a uživatele, kteří využívají služby IT4Innovations. Pro každý aktivní projekt je vytvořen projektový adresář, jehož životní cyklus striktně kopíruje životní cyklus projektu. Celková kapacita úložiště je 15 PB.

Kvantový počítač

V roce 2023 podepsalo IT4Innovations dohodu s EuroHPC JU o pořízení a provozování **kvantového počítače** mezinárodního konsorcia **LUMI-Q**, který bude instalován a provozován v IT4Innovations. Kvantový počítač bude založen na supravodivých qubitech v topologii ve tvaru hvězdy, která minimalizuje počet tzv. výměnných (swap) operací, což umožňuje provádění velmi složitých kvantových algoritmů. Kvantový počítač bude obsahovat nejméně 20 qubitů. Zároveň bude propojen se superpočítačem Karolina a stane se prvním českým kvantovým počítačem. Kvantový počítač konsorcia LUMI-Q bude k dispozici širokému spektru evropských uživatelů, od vědeckých komunit až po průmysl a veřejný sektor. Připravovaná kvantová výpočetní infrastruktura podpoří vývoj široké škály aplikací s průmyslovým, vědeckým a společenským významem pro Evropu a rozšíří evropskou výpočetní infrastrukturu o nové technologie.

Technické parametry superpočítačů

	NVIDIA DGX-2	Barbora	Karolina	LUMI
Uvedení do provozu	jaro 2019	podzim 2019	léto 2021	únor 2023
Teoretický výkon	130 TFlop/s	849 TFlop/s	15,7 PFlop/s	531,5 PFlop/s
Operační systém	CentOS 7	RHEL 8	Rocky Linux 8.x	HPE Cray OS
Výpočetní uzly	1	201	831	5 042
Typy výpočetních uzlů	<p>1 GPU uzel 2x Intel Xeon Platinum 8168, 24jádrový, 2,7 GHz, 1,5 TB RAM, 16x NVIDIA Tesla V100, 32 GB HBM2</p>	<p>192 CPU uzlů 2x Intel Cascade Lake 6240, 18jádrový, 2,6 GHz, 192 GB RAM</p> <p>8 GPU uzlů 2x Intel Skylake 6126, 12jádrový, 2,6 GHz, 192 GB RAM, 4x NVIDIA Tesla V100, 16 GB HBM2</p> <p>1 SMP uzel 8x Intel Xeon 8153, 16jádrový, 2,0 GHz, 6 TB RAM</p>	<p>756 CPU uzlů 2x AMD EPYC 7h12, 64jádrový, 2,6 GHz, 256 GB RAM</p> <p>72 GPU uzlů 2x AMD EPYC 7763, 64jádrový, 2,45 GHz, 1 TB RAM, 8x NVIDIA A100, 40 GB HBM2</p> <p>1 data analytics uzel 32x Intel Xeon-SC 8628, 24jádrový, 2,9 GHz, 24 TB RAM</p> <p>2 vizualizační uzly 2x AMD EPYC 7452, 32jádrový, 2,35 GHz, 256 GB RAM, 1x NVIDIA RTX 6000 GPU</p>	<p>2 048 CPU uzlů 2x AMD EPYC 7763, 64jádrový, 2,45 GHz, 256-1.024 GB RAM</p> <p>2 978 GPU uzlů 1x AMD EPYC 7A53, 64jádrový, 2,45 GHz, 512 GB RAM, 4x AMD Instinct MI250X GPUs, 128 GB HBM2e</p> <p>8 data analytics uzlů 2x AMD EPYC 7742, 64jádrový, 2,25 GHz, 4 TB RAM</p> <p>8 vizualizačních uzlů 2x AMD EPYC 7742, 64jádrový, 2,25 GHz, 2 TB RAM, 8x NVIDIA A40 GPU</p>
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
Úložný prostor	30 TB NVMe	29 TB / home 310 TB / scratch (28 GB/s)	30 TB / home 1 275 TB / sratch (NVMe, 730 GB/s zápis, 1.198 GB/s čtení)	81 PB / (home + project + scratch) (240 GB/s)
Síť	Infiniband EDR 100 Gb/s	Infiniband HDR 200 Gb/s	Infiniband HDR 200 Gb/s	Slingshot-11 200 Gb/s



↔ Na konci října proběhl již 7. ročník Konference uživatelů IT4Innovations.

Přidělování výpočetního času

Poskytování výpočetního času je jedním z hlavních posláních IT4Innovations. Superpočítače jsou k dispozici českým vědeckým komunitám a průmyslovým podnikům nepřetržitě od roku 2013, kdy byl zprovozněn první superpočítač Anselm.

V červnu roku 2023 vstoupila v platnost nová pravidla pro přidělování HPC zdrojů. Ta přinášejí novinky či nově pojmenovávají zavedené typy získávání výpočetního času na našich systémech. Výpočetní čas na superpočítačích v IT4Innovations lze dle nich získat jedním z následujících způsobů:

- **Otevřený přístup:** upravuje rozdělení výpočetních zdrojů výzkumné komunitě České republiky na základě vědecké excelence, výpočetní kompetence a připravenosti a předpokládaného přínosu pro společnost a ekonomiku. Výpočetní zdroje jsou rozdělovány formou otevřeného přístupu, která má za cíl zpřístupnit HPC zdroje pro výzkumné a vývojové činnosti nehmotné povahy. Oprávněnými uchazeči jsou výzkumné organizace se sídlem v České republice, resp. jejich zaměstnanci. Největší podíl výpočetního času se rozděluje v rámci Veřejných grantových soutěží.
- **Přístup pro tematické využití kapacit:** výpočetní zdroje jsou poskytovány pro společensky důležité úkoly, výukové a vzdělávací aktivity, komerční činnost a vlastní výzkum infrastruktury. Žádost lze podat kdykoliv.
- **Grantové soutěže,** které vyhlašuje celoevropský společný podnik EuroHPC.

Od roku 2013 do konce roku 2023 využilo výpočetní čas v IT4Innovations **2 174 projektů** z různých vědeckých oblastí. Tyto projekty zahrnovaly širokou škálu disciplín, včetně vývoje nových materiálů a léků, inženýrských úloh a vizualizace vědeckých dat. V posledních letech se projekty stále více zaměřují na oblasti jako jsou strojové učení a další pokročilé technologie v souvislosti s rozvojem umělé inteligence a výzkumem kvantových algoritmů.

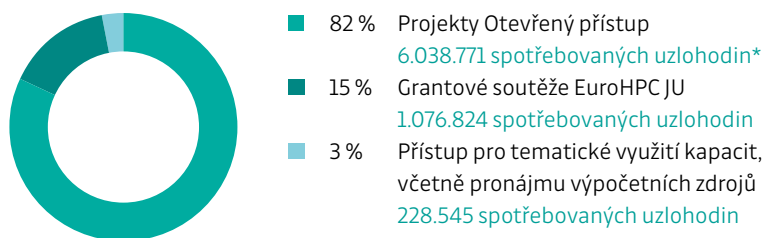
Počet aktivních projektů v roce 2023 byl **629**. Výpočetní čas, který tyto projekty v roce 2023 spotřebovaly, dosáhl celkové hodnoty **7 344 140** uzlohodin.



↔ Barbora

Superpočítač Barbora byl zprovozněn v roce 2019. Barbora odkazuje nejen k patronce havířů, ale jednalo se také o jméno jednoho z dolů v Ostravsko-karvinském revíru.

Rozdělení výpočetního času v roce 2023



*Spotřebované uzlohodiny dávají představu o tom, kolik výpočetního času bylo v roce 2023 skutečně spotřebováno. Celkovou hodnotu zde tvoří veškeré projekty, které se reálně v tomto roce v IT4Innovations počítaly na superpočítačích Karolina, Barbora a systému NVIDIA DGX-2.

Na superpočítači LUMI byly v rámci otevřeného přístupu přiděleny výpočetní zdroje 101 projektům, které ke konci roku 2023 spotřebovaly téměř půl milionu uzlohodin.

Otevřený přístup / Veřejné grantové soutěže

V roce 2023 byly vyhlášeny tři Veřejné grantové soutěže a jedna mimořádná výzva, ve kterých bylo podpořeno 221 výzkumných projektů, z toho 23 víceletých. Konkrétně se jednalo o 27., 28. a 29. kolo a jednu mimořádnou výzvu určenou pro AI komunitu.

Dle harmonogramu jednotlivých kol získali úspěšní žadatelé přístup k výpočetním kapacitám v průběhu roku 2023. U standardních projektů jsou výpočetní prostředky poskytovány po dobu 12 měsíců, u víceletých projektů po dobu 24 nebo 36 měsíců a jejich účelem je podpořit dlouhodobé vědecké projekty.

Ve zmíněných třech Veřejných grantových soutěžích (a v jedné mimořádné výzvě) uživatelé žádali o téměř 10 milionů uzlohodin. Zájem o výpočetní čas převyšuje nabízené zdroje, proto přistoupila alokační komise ke snížení alokací hodnocených projektů. Celkově bylo 221 projektům v těchto kolech Veřejné grantové soutěže alokováno 8,7 milionů uzlohodin na superpočítačích Karolina, Barbora, LUMI a systému NVIDIA DGX-2.

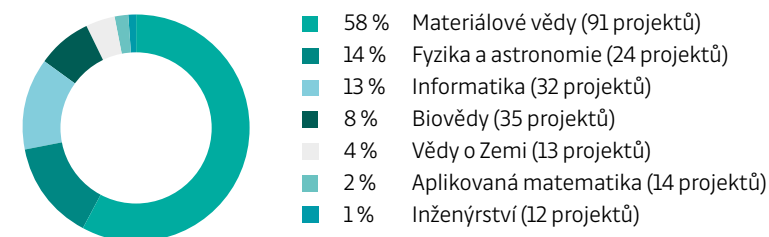
Nejvíce výpočetního času získaly projekty z oblasti materiálových věd. Na druhém místě se umístily projekty z oboru fyziky a astronomie a bronzová příčka patřila informatice.

Dle institucí na superpočítačích IT4Innovations získali nejvyšší alokace pro své projekty vědci a vědkyně z Akademie věd České republiky. Druhé místo patří VŠB – Technické univerzitě Ostrava a třetí příčka Vysokému učení technickému v Brně.

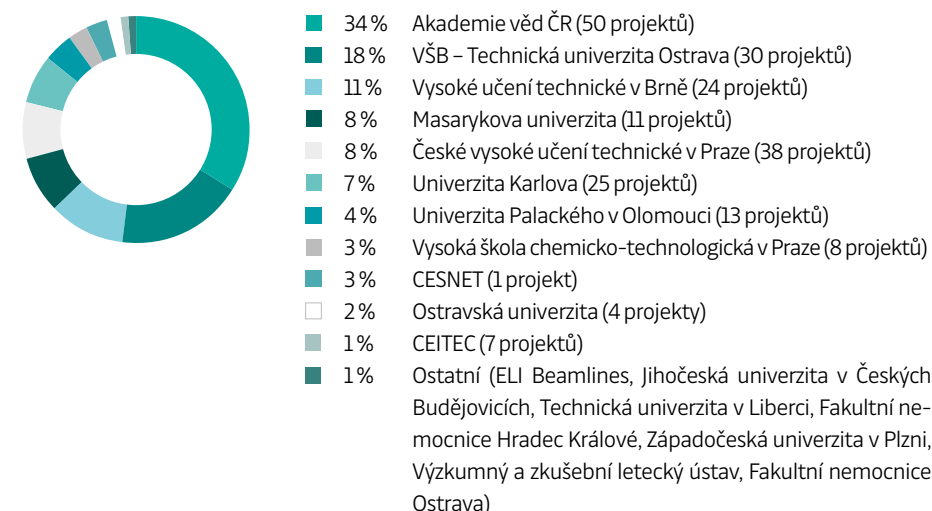
Nejvíce projektů, které získaly výpočetní čas, podali vědci a vědkyně z ústavů Akademie věd České republiky, Českého vysokého učení technického v Praze a VŠB-TUO.

Řešitelé ze 12 různých ústavů Akademie věd České republiky získali výpočetní čas pro 50 svých projektů, přičemž k ústavům nejvíce využívající infrastrukturu IT4Innovations patří stejně jako v roce 2022 Ústav organické chemie a biochemie, dále pak Fyzikální ústav, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského a Ústav fyziky materiálů.

Výpočetní zdroje přidělené ve Veřejných grantových soutěžích v roce 2023 dle vědních oborů



Výpočetní zdroje přidělené ve Veřejných grantových soutěžích v roce 2023 dle institucí



Otevřený přístup

Výpočetní zdroje, které byly spotřebovány v rámci veřejných grantových soutěží, včetně jedné mimořádné výzvy, dosáhly hodnoty 6 032 073 uzlohodin. V rámci rychlého a testovacího přístupu, jehož primárním cílem je příprava na grantovou soutěž, bylo spotřebováno 6 638 uzlohodin.

Tematické využití kapacit

V roce 2023 bylo pro společensky důležité úkoly, výukové a vzdělávací aktivity a vlastní výzkum infrastruktury využito 161 250 uzlohodin.

Výpočetní zdroje, které byly poskytnuty v rámci placeného pronájmu, dosáhly 67 295 uzlohodin. Jednalo se o komerční projekty následujících společností: AIRMOBIS s.r.o., DHI A/S, GLASS SERVICE, a.s., mobisOne s.r.o. a Varroc Lighting Systems, s.r.o.

Na začátku prosince 2023 bylo, v rámci mimořádné výzvy alokováno 115 007 uzlohodin na LUMI-G pro 9 projektů z oblasti umělé inteligence řešitelů především z Českého vysokého učení technického v Praze, ale také z Technické univerzity v Liberci. Jednalo se o výzvu pro společensky důležité úkoly: přístup pro AI aplikace a aplikace akcelerované GPU.

Grantové soutěže EuroHPC JU

V roce 2023 bylo v rámci těchto soutěží poskytnuto **1 076 824 uzlohodin** na superpočítači Karolina, o které se podělilo **153 projektů**. Nejvíce projektů patří vědkyním a vědcům z rakouských organizací (například Johannes Kepler University Linz – 15 projektů), z italských (například Politecnico di Milano – 3 projekty) a dánských (např. University of Copenhagen a Technical University of Denmark – po 8 projektech).



- 25 projektů Rakousko
- 24 projektů Itálie
- 18 projektů Dánsko
- 14 projektů Francie
- 11 projektů Španělsko
- 9 projektů Německo
- 9 projektů Švédsko
- 7 projektů Česká republika
- 7 projektů Turecko
- 4 projekty Belgie
- 4 projekty Rumunsko
- 3 projekty Velká Británie
- 18 projektů Další (Izrael, Portugalsko, Irsko, Norsko, Řecko, Švýcarsko, Nizozemsko, Finsko, Slovinsko, Maďarsko, Polsko, Lucembursko)

Uživatelé výpočetních zdrojů

Počet aktivních uživatelů výpočetní infrastruktury IT4Innovations se v roce 2023 meziročně zvýšil o 48 % a vyšplhal se na **2 090**.

Technická podpora, kterou IT4Innovations svým uživatelům nabízí, obdržela v roce 2023 celkem **1 598 podnětů a žádostí**. Interní reakční doba (24 hodin na první odpověď) byla dodržena u 98,4 % podnětů. Interní doba prvního uzavření, která by neměla přesáhnout 30 dnů, byla dodržena u 90 % podnětů.



5

Výzkum a vývoj

IT4Innovations se zabývá excelentním výzkumem zejména v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC), datových analýz (HPDA), kvantového počítání (QC) a umělé inteligence (AI), včetně jejích aplikací ve vědě i průmyslu.

IT4Innovations je výzkumným a vývojovým centrem se silnými mezinárodními vazbami, je zapojeno ve všech aktivitách společného evropského podniku EuroHPC a v klíčových mezinárodních infrastrukturách, iniciativách a sdruženích (PRACE, ETP4HPC, EUDAT, BDVA, EOSC, iRODS).

V roce 2023 se podílelo na řešení **21 mezinárodních projektů** financovaných z programů Horizont 2020, Horizont Evropa a Digitální Evropa, přičemž projekty EXA4MIND a EDIH Ostrava koordinuje. Také se stalo členem Center excellence MaX a SPACE.

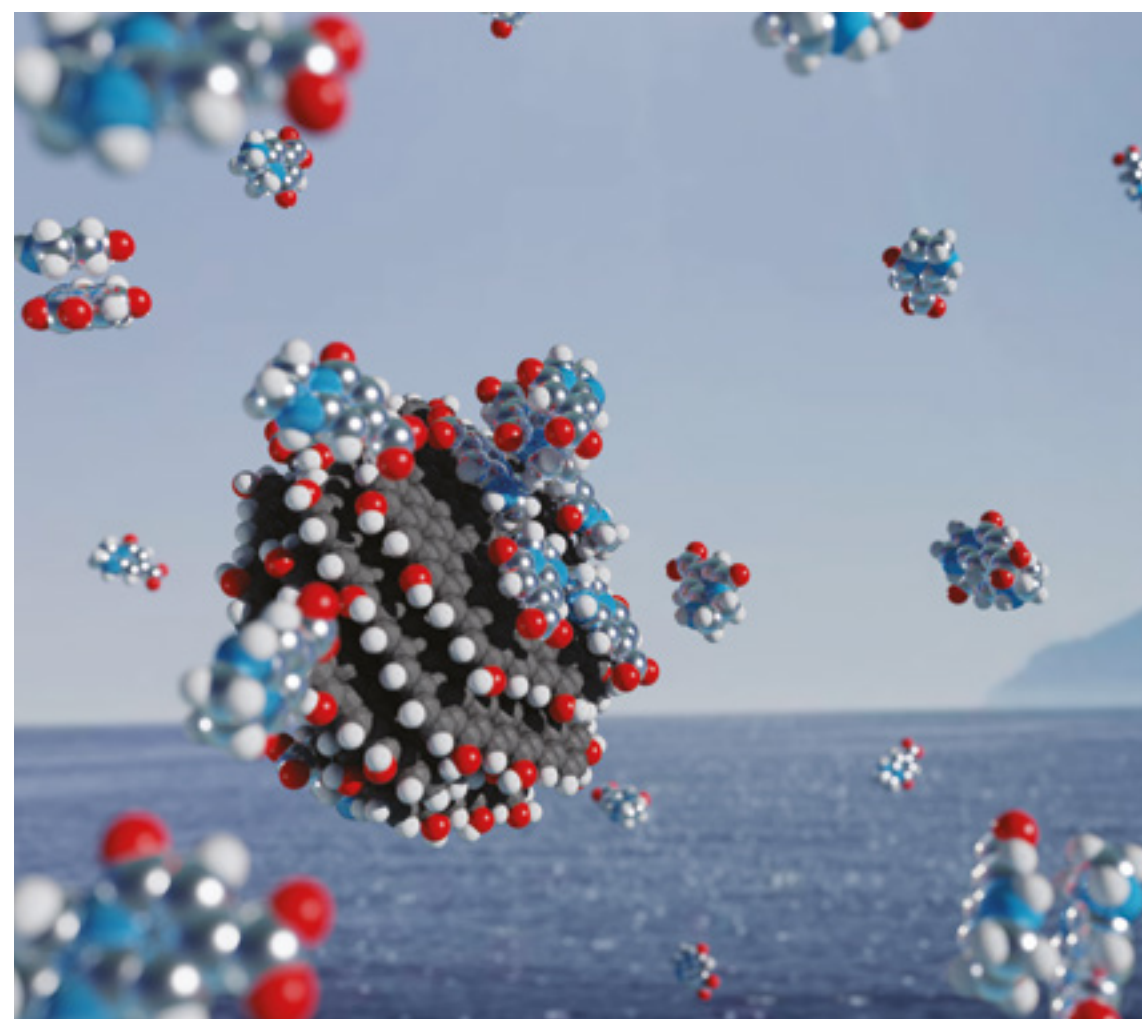
Od roku 2020 zastává IT4Innovations roli Národního centra kompetence pro HPC v rámci evropského projektu EuroCC, jehož druhá fáze EuroCC 2 odstartovala právě v roce 2023.

IT4Innovations spolupracuje od roku 2015 i s Evropskou kosmickou agenturou, přičemž v roce 2023 začalo se čtyřmi partnery řešit nový projekt AIOPEN (Platform Extensions with AI Capabilities).

Výzkum v IT4Innovations je soustředěn do pěti laboratoří:

- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace,
- Laboratoř pro výzkum infrastruktury,
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů,
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie,
- Laboratoř pro big data analýzy.

Výzkumné laboratoře IT4Innovations získaly v rámci 27. až 29. Veřejné grantové soutěže pro řešení **21 vědeckých projektů** výpočetní čas v celkové výši dosahující téměř **1,47 milionů uzlohodin**, což představuje téměř 17 % z celkové přidělené alokace všech podpořených projektů. Nejvíce projektů podali zaměstnanci Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace a nejvíce výpočetních zdrojů získala Laboratoř modelování pro nanotechnologie.



↔ Zahájen projekt Experimentální a teoretické studie luminoforů s chirálními uhlíkovými tečkami emitujícími blízké infračervené záření

Projekt je podpořen programem Moravskoslezského kraje Global Experts.

Přehled výsledků výzkumu a vývoje v roce 2023

Výsledky v členění dle metodiky RIV 2017+

V této podkapitole jsou představeny výsledky výzkumu a vývoje IT4Innovations v roce 2023.

Shrnutí dosažených výsledků výzkumu a vývoje IT4Innovations v roce 2023

Výsledky v členění dle metodiky RIV 2017+	Počet
Jimp	118
JSC	5
Jost	0
B – odborná kniha	1
C – kapitola v odborné knize	0
D – stať ve sborníku	22
P – patent	1
F – užitný vzor, průmyslový vzor	0
Z – poloprovoz, ověřená technologie	1
G – prototyp, funkční vzorek	0
H – výsledky promítnuté do norem, směrnic	0
N – metodika, specializovaná mapa	0
R – software	27
V – výzkumná zpráva	8

Časopisecké publikace typu Jimp a JSC za rok 2023 dle jednotlivých laboratoří a umístění

Výsledky dle jednotlivých laboratoří a umístění	D1	Q1/D1	Q2	Q3	Q4	Celkem
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	12,5*	4	3	0	0	19,5
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	2,5*	3	2	1	0	8,5
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	2	4	2,5*	1	0	9,5
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	33,5*	17	6,5*	1	1	59
Laboratoř pro big data analýzy	11,5*	12	3	0	0	26,5
Celkem	62	40	17	3	1	123

Rozdělení časopisů do kategorií D1, Q1/D1, ..., Q4 je dáno jejich nejlepším umístěním v oborových kategoriích v databázích Web of Science a Scopus.

*Sdílené články mezi laboratořemi

Počet časopiseckých publikací za rok 2023 dle jednotlivých laboratoří



19,5	Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
8,5	Laboratoř pro výzkum infrastruktury
9,5	Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
59	Laboratoř modelování pro nanotechnologie
26,5	Laboratoř pro big data analýzy

Seznam publikací v D1 seřazených dle jednotlivých laboratoří

Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

- Vavra O., Beránek J., Stourac J., Šurkovský M., Filipovic J., Damborsky J., Martinovič J., Bednar D.: *pyCaverDock: Python implementation of the popular tool for analysis of ligand transport with advanced caching and batch calculation support*. Bioinformatics, 2023. DOI 10.1093/bioinformatics/btad443. (D1, IF 5.8)
- Lampart M., Zapoměl J.: *The disturbance influence on vibration of a belt device driven by a crank mechanism*. Chaos, Solitons & Fractals, 2023. DOI 10.1016/j.chaos.2023.113634. (D1, IF 7.8)
- Maška M., Ulman V., Delgado-Rodriguez P., Gómez-de-Mariscal E., Nečasová T., Guerrero Peña Fidel A., Ren Tsang Ing, Meyerowitz Elliot M., Scherr T., Löffler K., Mikut R., Guo T., Wang Y., Allebach Jan P., Bao R., Al-Shakarji Noor M., Rahmon G., Toubal Imad E., Palaniappan K., Lux F., Matula P., Sugawara K., Magnusson Klass E.G., Aho L., Cohen Andrew R., Arbelle A., Ben-Haim T., Raviv Tammy R., Isensee F., Jäger Paul F., Maier-Hein Klaus H., Yanming Z., Ederra C., Urbiola A., Meijering E., Cunha A., Muñoz-Barrutia A., Kozubek M., Ortiz-de-Solórzano C.: *The Cell Tracking Challenge: 10 years of objective benchmarking*. Nature Methods, 2023. DOI 10.1038/s41592-023-01879-y. (D1, IF 48)
- Klein L., Fulneček J., Seidl D., Prokop L., Mišák S., Dvorský J., Piecha M.: *A Data Set of Signals from an Antenna for Detection of Partial Discharges in Overhead Insulated Power Line*. Scientific data, 2023. DOI 10.1038/s41597-023-02451-1. (D1, IF 9.8)
- Lampart M., Lampartová A., Orlando G.: *On risk and market sentiments driving financial share price dynamics*. Nonlinear Dynamics, 2023. DOI 10.1007/s11071-023-08702-5. (D1, IF 5.6)
- Klein L., Seidl D., Fulneček J., Prokop L., Mišák S., Dvorský J.: *Antenna contactless partial discharges detection in covered conductors using ensemble stacking neural networks*. Expert Systems with Applications, 2023. DOI 10.1016/j.eswa.2022.118910. (D1, IF 8.5)
- Zelinka I., Koječký L., Lampart M., Nowaková J., Plucar J.: *iSOMA swarm intelligence algorithm in synthesis of quantum computing circuits*. Applied Soft Computing, 2023. DOI 10.1016/j.asoc.2023.110350. (D1, IF 8.5)

- Riaz M. B., Jhangeer A., Martinovič J., Kazmi Syeda S.: *Dynamics and Soliton Propagation in a Modified Oskolkov Equation: Phase Plot Insights*. Symmetry, 2023. DOI 10.3390/sym15122171. (D1, IF 2.7)
- Halfar Radek, Lawson B.A.J.: Weber dos Santos Rodrigo; Burrage K.: *Recurrence quantification analysis for fine-scale characterisation of arrhythmic patterns in cardiac tissue*. Scientific Reports, 2023. DOI 10.1038/s41598-023-38256-w. (D1, IF 4.6)
- Topolánek D., Krčál V., Foltyn L., Praks P., Vysocký J., Praksová R., Pretticco G., Fulli G.: *Optimization method for short circuit current reduction in extensive meshed LV network*. International Journal of Electrical Power & Energy Systems, 2023. DOI 10.1016/j.ijepes.2023.109203. (D1, IF 5.2)
- Zahra A., Mardan S. A., Riaz M. B.: *Conformal motion for higher-dimensional compact objects*. European Physical Journal C, 2023. DOI 10.1140/epjc/s10052-023-12289-x. (D1, IF 4.4)
- Riaz M. B., Naseer F., Abbas M., Abd El-Rahman M., Nazir T., Chan Choon K.: *Solitary wave solutions of Sawada-Kotera equation using two efficient analytical methods*. AIMS Mathematics, 2023. DOI 10.3934/math.20231601. (D1, IF 3.5)
- Marchamalo-Sacristán M., Ruiz-Armenteros A.M., Lamas-Fernández F., González-Rodrigo B., Martínez-Marín R., Delgado-Blasco J.M., Bakon M., Lazecký M., Perissin D., Papco J., Sousa J.J.: *MT-InSAR and Dam Modeling for the Comprehensive Monitoring of an Earth-Fill Dam: The Case of the Benívar Dam (Almería, Spain)*. Remote Sensing, 2023. DOI 10.3390/rs15112802. (D1, IF 5)

Laboratoř pro výzkum infrastruktury

- Singh U., Maca P., Hanel M., Markonis Y., Nidamanuri Rama R., Nasreen S., Blocher Johanna R., Strnad F., Vorel J., Říha L., Raghubanshi Akhilesh S.: *Hybrid multi-model ensemble learning for reconstructing gridded runoff of Europe for 500 years*. Information Fusion, 2023. DOI 10.1016/j.inffus.2023.101807. (D1, IF 18.6)
- Civiš S., Lamanec Maximilián, Špirko V., Kubišta J., Špeřko M., Hobza P.: *Hydrogen Bonding with Hydrific Hydrogen-Experimental Low-Temperature IR and Computational Study: Is a Revised Definition of Hydrogen Bonding Appropriate?* Journal of the American Chemical Society, 2023. DOI 10.1021/jacs.3c00802. (D1, IF 15)
- Dostál Z., Brzobohatý T., Vlach O., Meca O., Sadowská M.: *Hybrid TFETI domain decomposition with the clusters joined by faces' rigid modes for solving huge 3D elastic problems*. Computational Mechanics, 2023. DOI 10.1007/s00466-022-02242-2. (D1, IF 4.1)

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

- Dostál Z., Brzobohatý T., Vlach O., Meca O., Sadowská M.: *Hybrid TFETI domain decomposition with the clusters joined by faces' rigid modes for solving huge 3D elastic problems*. Computational Mechanics, 2023. DOI 10.1007/s00466-022-02242-2. (D1, IF 4.1)

- Gebauer M., Blejchař T., Brzobohatý T., Nevřela M.: *Conjugate Heat Transfer Model for an Induction Motor and Its Adequate FEM Model*. Symmetry, 2023. DOI 10.3390/sym15071294. (D1, IF 2.7)

Laboratoř modelování pro nanotechnologie

- Hemmat M., Ayari S., Mičica M., Vergnet H., Guo S., Arfaoui M., Yu X., Vala D., Wright A., Postava K., Mangeney J., Carosella F., Jaziri S., Wang QJ., Zheng L., Tignon J., Ferreira R., Baudin E., Dhillion S.: *Layer-controlled nonlinear terahertz valleytronics in two-dimensional semimetal and semiconductor PtSe₂*. Infomat, 2023. DOI 10.1002/inf2.12468. (D1, IF 22.7)
- Havela L., Legut D., Kolorenc J.: *Hydrogen in actinides: electronic and lattice properties*. Reports on Progress in Physics, 2023. DOI 10.1088/1361-6633/acbe50. (D1, IF 18.1)
- Civiš S., Lamanec M., Špirko V., Kubišta J., Špeřko M., Hobza P.: *Hydrogen Bonding with Hydrific Hydrogen-Experimental Low-Temperature IR and Computational Study: Is a Revised Definition of Hydrogen Bonding Appropriate?* Journal of the American Chemical Society, 2023. DOI 10.1021/jacs.3c00802. (D1, IF 15)
- Deshmukh S., Ghosh K., Pykal M., Otyepka M., Pumera M.: *Laser-Induced MX-ene-Functionalized Graphene Nanoarchitectonics-Based Microsupercapacitor for Health Monitoring Application*. ACS Nano, 2023. DOI 10.1021/acsnano.3c07319. (D1, IF 17.1)
- Zhang Y., Liu ZR., Yao BN., Legut D., Zhang RF.: *Atomic insights into inter-face-mediated plasticity and engineering principles for heterogeneous serrated interfaces*. International Journal of Plasticity, 2023. DOI 10.1016/j.ijplas.2022.103498. (D1, IF 9.8)
- Portniagin A. S., Sergeeva K. A., Kershaw S. V., Rogach A.: *Cation-Exchange-Derived Wurtzite HgTe Nanorods for Sensitive Photodetection in the Short-Wavelength Infrared Range*. Chemistry of Materials, 2023. DOI 10.1021/acs.chemmater.3c01144. (D1, IF 8.6)
- Lawson R., Čechová P., Zarrouk E., Javellaud J., Bazgier V., Otyepka M., Trouillas P., Picard N., Marquet P., Saint-Marcoux F., El Balkhi S.: *Metabolic interactions of benzodiazepines with oxycodone ex vivo and toxicity depending on usage patterns in an animal model*. British Journal of Pharmacology, 2023. DOI 10.1111/bph.15765. (D1, IF 7.3)
- Poulouse A. Ch., Medved' M., Bakuru V. R., Sharma A., Singh D., Kalidindi S. B., Bares H., Otyepka M., Jayaramulu K., Bakandritsos A., Zbořil R.: *Acidic graphene organocatalyst for the superior transformation of wastes into high-added-value chemicals*. Nature Communications, 2023. DOI 10.1038/s41467-023-36602-0. (D1, IF 3.24)
- Lesňák M., Cvejn D., Petr M., Peikertová P., Gabor R., Fördös T., Czernek P., Plachá D.: *A Novel N-doped Carbon Nanomaterial – Carbon NanoMousse*. Journal of Materials Chemistry A, 2023. DOI 10.1039/d2ta07947j. (D1, IF 11.9)

- Yang Q., Nguyen Emily P., Panacek D., Sedajova V., Hruby V., Rosati G., Silva Cecilia de Carvalho C., Bakandritsos A., Otyepka M., Merkoci A.: **Metal-free cysteamine-functionalized graphene alleviates mutual interferences in heavy metal electrochemical detection**. *Green Chemistry*, 2023. DOI 10.1039/d2gc02978b. (D1, IF 9.8)
- Mlynsky V., Kuhrova P., Stadlbauer P., Krepl M., Otyepka M., Banáš P., Sponer J.: **Simple Adjustment of Intranucleotide Base-Phosphate Interaction in the OL3 AMBER Force Field Improves RNA Simulations**. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2023. DOI 10.1021/acs.jctc.3c00990. (D1, IF 5.5)
- Stadlbauer P., Mlýnský V., Krepl M., Šponer J.: **Complexity of Guanine Quadruplex Unfolding Pathways Revealed by Atomistic Pulling Simulations**. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2023. DOI 10.1021/acs.jcim.3c00171. (D1, IF 5.6)
- Shick A.B., Halevy I., Tchaplianka M., Legut D.: **Itinerant-localized dichotomy in magnetic anisotropic properties of U-based ferromagnets**. *Scientific Reports*, 2023. DOI 10.1038/s41598-023-29823-2. (D1, IF 4.6)
- Kadam Ravishankar G., Medved M., Kumar S., Zaoralová D., Zoppellaro G., Baďura Z., Montini T., Bakandritsos A., Fonda E., Tomanec O., Otyepka M., Varma Rajender S., Gawande Manoj B., Fornasiero P., Zbořil R.: **Linear-Structure Single-Atom Gold(I) Catalyst for Dehydrogenative Coupling of Organosilanes with Alcohols**. *ACS Catalysis*, 2023. DOI 10.1021/acscatal.3c03937. (D1, IF 12.9)
- Zdrzil L., Panacek D., Sedajova V., Baďura Z., Langer M., Medved M., Paloncayova M., Scheibe M., Kalytchuk S., Zoppellaro G., Kment Š., Cadranel A., Bakandritsos A., Guldi Dirk M., Otyepka M., Zbořil R.: **Carbon Dots Enabling Parts-Per-Billion Sensitive and Ultraselective Photoluminescence Lifetime-Based Sensing of Inorganic Mercury**. *Advanced Optical Materials*, 2023. DOI 10.1002/adom.202300750. (D1, IF 9)
- Padinjareveetil A.K.K., Perales-Rondon J.V., Zaoralová D., Otyepka M., Alduhaish O., Pumera M.: **Fe-MOF Catalytic Nanoarchitectonic toward Electrochemical Ammonia Production**. *ACS applied materials & interfaces*, 2023. DOI 10.1021/acscami.3c12822. (D1, IF 9.5)
- Vacek J., Zatloukalova M., Bartheldyova E., Řeha D., Minofar B., Bednarova K., Renciuik D., Coufal J., Fojta M., Zadny J., Gessini A., Rossi B., Storch J., Kabelac M.: **Hexahelicene DNA-binding: Minor groove selectivity, semi-intercalation and chiral recognition**. *International Journal of Biological Macromolecules*, 2023. DOI 10.1016/j.ijbiomac.2023.125905. (D1, IF 8.2)
- Medved' M., Di Donato M., Buma Wybren J., Laurent Adele D., Lameijer L., Hrivnák T., Romanov I., Tran S., Feringa Ben L., Szymanski W., Woolley A.: **Mechanistic Basis for Red Light Switching of Azonium Ions**. *Journal of the American Chemical Society*, 2023. DOI 10.1021/jacs.3c06157. (D1, IF 15)
- Wang S., Huang Z., Tang B., Li X., Zhao X., Chen Z., Zhi C., Rogatch A.: **Conversion-Type Organic-Inorganic Tin-Based Perovskite Cathodes for Durable Aqueous Zinc-Iodine Batteries**. *Advanced Energy Materials*, 2023. DOI 10.1002/aenm.202300922. (D1, IF 27.8)
- Flauzino J. M. R., Nalepa M.-A., Chronopoulos D. D., Sedajova V., Panacek D., Jakubec P., Kuhrova P., Pykal M., Banas P., Panacek A., Bakandritsos A., Otyepka M.: **Click and Detect: Versatile Ampicillin Aptasensor Enabled by Click Chemistry on a Graphene-Alkyne Derivative**. *Small*, 2023. DOI 10.1002/sml.202207216. (D1, IF 13.3)
- Mallada B., Ondráček M., Lamanec M., Gallardo A., Jiménez-Martín A., de la Torre B., Hobza P.; Jelínek P.: **Visualization of π -hole in molecules by means of Kelvin probe force microscopy**. *Nature Communications*, 2023. DOI 10.1038/s41467-023-40593-3. (D1, IF 16.6)
- Zhang Z., Sponer J., Bussi G., Mlýnský V., Sulc P., Simmons Chad R., Stephanopoulos N., Krepl M.: **Atomistic Picture of Opening-Closing Dynamics of DNA Holliday Junction Obtained by Molecular Simulations**. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2023. DOI 10.1021/acs.jcim.3c00358. (D1, IF 5.6)
- Hu Sile, Tang Bing, Kershaw Stephen V., Rogatch A.: **Metal Halide Perovskite Photo-Field-Effect Transistors with Chiral Selectivity**. *ACS applied materials & interfaces*, 2023. DOI 10.1021/acscami.3c03201. (D1, IF 9.5)
- Zhang X., Zhang Y., Guo J., Lu M., Sun S., Han C., Yang X., Kershaw Stephen V., Zheng W., Rogatch A.: **Highly Stable and Efficient Light-Emitting Diodes Based on Orthorhombic-CsPbI₃ Nanocrystals**. *ACS Nano*, 2023. DOI 10.1021/acsnano.3c00789. (D1, IF 17.1)
- Veverka J., Vilémová M., Lukáč F., Kadzielawa A. P., Legut D.; Vontorová J., Kozlík J., Chráska T.: **Decreasing the W-Cr solid solution decomposition rate: Theory, modelling and experimental verification**. *Journal of Nuclear Materials*, 2023. DOI 10.1016/j.jnucmat.2023.154288. (D1, IF 3.1)
- More-Chevalier J., Wdowik U. D., Legut D., Cichoň S., de Prado E., Gregora I., Bulíř J., Novotný M., Fekete L., Lančok J.: **Effect of oxygen defects on microstructure, optical and vibrational properties of ScN films deposited on MgO substrate from experiment and first principles**. *Applied Surface Science*, 2023. DOI 10.1016/j.apsusc.2022.156203. (D1, IF 6.7)
- Kuhrova P., Mlynsky V., Otyepka M., Sponer J., Banas P.: **Sensitivity of the RNA Structure to Ion Conditions as Probed by Molecular Dynamics Simulations of Common Canonical RNA Duplexes**. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2023. DOI 10.1021/acs.jcim.2c01438. (D1, IF 5.6)
- Dědek I., Bartusek S., Dvořáček J.J., Nečas J., Petruš J., Jakubec P., Kupka V., Otyepka M.: **Maximizing the electrochemical performance of supercapacitor electrodes from plastic waste**. *Journal of Energy Storage*, 2023. (D1, IF 9.4)
- Kadam Ravishankar G., Ye Tian-Nan, Zaoralova D., Medved M., Sharma P., Lu Y., Zoppellaro G., Tomanec O., Otyepka M., Zbořil R., Hosono H., Gawande Manoj B.: **Intermetallic Copper-Based Electride Catalyst with High Activity for C-H Oxidation and Cycloaddition of CO₂ into Epoxides**. *Small*, 2023. DOI 10.1002/sml.202307311. (D1, IF 13.3)

- Zhang B., Wang B., Ushakova Elena V., He B., Xing G., Tang Z., Rogatch A., Qu S.: **Assignment of Core and Surface States in Multicolor-Emissive Carbon Dots**. *Small*, 2023. DOI 10.1002/smll.202204158. (D1, IF 13.3)
- Langer M., Zdražil L., Medved' M., Otyepka M.: **Communication of molecular fluorophores with other photoluminescence centres in carbon dots**. *Nanoscale*, 2023. DOI 10.1039/d2nr05114a. (D1, IF 6.7)
- Zdrzil L., Badura Z., Langer M., Kalytchuk S., Panacek D., Scheibe M., Kment Š., Kmentova H., Thottappali Muhammed A., Mohammadi E., Medved M., Bakandritsos A., Zoppellaro G., Zbořil R., Otyepka M.: **Magnetic Polaron States in Photoluminescent Carbon Dots Enable Hydrogen Peroxide Photoproduction**. *Small*, 2023. DOI 10.1002/smll.202206587. (D1, IF 13.3)
- Lo R., Mašínová A., Lamanec M., Nachtigallová D., Hobza P.: **The unusual stability of H-bonded complexes in solvent caused by greater solvation energy of complex compared to those of isolated fragments**. *Journal of Computational Chemistry*, 2023. DOI 10.1002/jcc.26928. (D1, IF 3)
- Sergeeva K. A., Pavlov D. V., Seredin A. A., Mitsai E. V., Sergeev A. A., Modin E. B., Sokolova A. V., Lau Tsz Ch., Baryshnikova K. V., Petrov M. I., Kershaw S. V., Kuchmizhak A. A., Wong K. S., Rogatch A.: **Laser-Printed Plasmonic Metasurface Supporting Bound States in the Continuum Enhances and Shapes Infrared Spontaneous Emission of Coupled HgTe Quantum Dots**. *Advanced Functional Materials*, 2023. DOI 10.1002/adfm.202307660. (D1, IF 19)
- Yin W., Zhang X., Rogatch A., Zheng W.: **Emitter structure design of near-infrared quantum dot light-emitting devices**. *Materials Today*, 2023. DOI 10.1016/j.mat-tod.2023.06.004. (D1, IF 24.2)

Laboratoř pro big data analýzy

- Drungilas D., Kurmis M., Senulis A., Lukosius Z., Andziulis A., Januteniene J., Bogdevicius M., Jankunas V., Vozňák M.: **Deep reinforcement learning based optimization of automated guided vehicle time and energy consumption in a container terminal**. *Alexandria Engineering Journal*, 2023. DOI 10.1016/j.aej.2022.12.057. (D1, IF 6.8)
- Zelinka I., Kojecký L., Lampart M., Nowaková J., Plucar J.: **iSOMA swarm intelligence algorithm in synthesis of quantum computing circuits**. *Applied Soft Computing*, 2023. DOI 10.1016/j.asoc.2023.110350. (D1, IF 8.7)
- Zelinka I., Lara de Leon MA., Windsor LC., Lozi R.: **Softcomputing in identification of the origin of Voynich manuscript by comparison with ancient dialects**. *Applied Soft Computing*, 2023. DOI 10.1016/j.asoc.2023.110217. (D1, IF 8.7)
- Dutta T., Bhattacharyya S., Panigrahi BK., Zelinka I., Mrsić L.: **Multi-level quantum inspired metaheuristics for automatic clustering of hyperspectral images**. *Quantum Machine Intelligence*, 2023. DOI 10.1007/s42484-023-00110-7. (D1, IF 4.8)

Výsledky posledního
hodnocení dle modulu
M1 metodiky RIV 2017+
hodnocené známkami
1-3

- Fazio P., Mehić M., Vozňák M., de Rango F., Tropea M.: **A novel predictive approach for mobility activeness in mobile wireless networks**. *Computer Networks*, 2023. DOI 10.1016/j.comnet.2023.109689. (D1, IF 5.6)
- Le Si P., Nguyen TN., Vozňák M., Nguyen TM., Hoang TM., Minh BV., Tran PT.: **Improving the Capacity of NOMA Network Using Multiple Aerial Intelligent Reflecting Surfaces**. *IEEE Access*, 2023. DOI 10.1109/ACCESS.2023.3319675 (D1, IF 3.9)
- Minh BV., Le Anh T., Le Ch., Nguyen SQ., Phan V., Nguyen TN., Vozňák M.: **Performance Prediction in UAV-Terrestrial Networks With Hardware Noise**. *IEEE Access*, 2023. DOI 10.1109/ACCESS.2023.3325478. (D1, IF 3.9)
- Nguyen TN., Minh BV., Pham TT., Le Anh T., Vozňák M.: **Security-Reliability Analysis in CR-NOMA IoT Network Under I/Q Imbalance**. *IEEE Access*, 2023. DOI 10.1109/ACCESS.2023.3327789. (D1, IF 3.9)
- Vo DT., Van Chien T., Nguyen TN., Tran D., Vozňák M., Kim BS., Tu LT.: **SWIPT-Enabled Cooperative Wireless IoT Networks With Friendly Jammer and Eavesdropper: Outage and Intercept Probability Analysis**. *IEEE Access*, 2023. DOI 10.1109/ACCESS.2023.3303369. (D1, IF 3.9)
- Nguyen T., Tran D., Van ChT., Phan V., Nguyen NT., Vozňák M., Chatzionitas S., Ottersten B., Vincent PH.: **Physical Layer Security in AF-Based Cooperative SWIPT Sensor Networks**. *IEEE Sensors Journal*, 2023. DOI 10.1109/JSEN.2022.3224128 (D1, IF 4.3)
- Nguyen NT., Nguyen H., Nguyen N., Le A., Nguyen TN., Vozňák M.: **Performance Analysis of NOMA-based Hybrid Satellite-Terrestrial Relay System Using mmWave Technology**. *IEEE Access*, 2023. DOI 10.1109/ACCESS.2023.3238335. (D1, IF 3.9)
- Rejček L., Juryca K., Nguyen TNN., Beran L., Vozňák M.: **Whitening Filters Application for Ionospheric Propagation Delay Extraction**. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 2023. DOI 10.1109/TIM.2023.3279464. (D1, IF 5.6)

Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

- Zitzlsberger G.: **ERCNN-DRS Urban Change Monitoring**. Ev.č.: 017/15-12-2021. 2021 (software)
- Böhm S., Beránek J., Cima V., Martinovič J., Jansík B.: **HyperQueue**. Ev.č.: 018/15-12-2021. 2021 (software)

Laboratoř pro výzkum infrastruktury

- Vysocký O., Říha L.: **MERICwrapper**. Ev.č.: 014/13-12-2021. 2021 (software)
- Jaroš M., Říha L., Strakoš P.: **CyclesPhi renderer v2**. Ev.č.: 013/09-12-2021. 2021 (software)



Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

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

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
42,84 FTE

Významné události

- Zahájen projekt programu Horizont Evropa – **EXA4MIND**, jehož cílem je vytvořit platformu pro extrémně objemná data, která propojí datová úložiště a superpočítače. Projekt koordinuje IT4Innovations.
- Jan Martinovič převzal **ocenění** za získání projektu EXA4MIND na slavnostním zasedání Vědecké rady VŠB-TUO.
- **Voicebot**, který se aktivuje při extrémním přetížení tísňových linek a vyvinuli jej mimo jiné vědci z IT4Innovations vyhrál **cenu evropské iniciativy** podporující využití AI ve veřejné správě DT4REGIONS za nejnovativnější řešení.
- Odstartoval projekt s názvem Integration of biodiversity monitoring data into the Digital Twin Ocean (**DTO-BioFLOW**). Do řešení projektu je zapojeno 30 partnerů, včetně IT4Innovations.
- Evropská kosmická agentura (ESA) podpořila projekt **AIOPEN**, na kterém IT4Innovations spolupracuje se společnostmi Space Applications Services, Telespazio, KP Labs a SERCO.
- V roce 2023 pokračovala spolupráce na projektu s **Evropskou kosmickou agenturou** (ESA) v rámci hospodářské smlouvy ESA-TEP 4.
- MŠMT ČR schválilo financování projektu **IPs EOSC-CZ**, zastřešujícího mezinárodní iniciativu EOSC (European Open Science Cloud) v Česku. EOSC-CZ koordinuje Masarykova univerzita.
- Ministerstvo vnitra ČR podpořilo **Výzkum holistického modelu propojené kritické elektroenergetické a komunikační infrastruktury**. Výstupy projektu napomůžou porozumět vnitřním a skrytým vzájemným vazbám i jejich možnému negativnímu efektu.
- Výzkumné výsledky iniciativy **Cell Tracking Challenge**, do níž je zapojeno i IT4Innovations, byly publikovány v prestižním časopise Nature Methods.
- V roce 2023 pokračovala spolupráce s **Fondazione LINKS** (na projektu B-CRATOS) v rámci hospodářské smlouvy.
- V IT4Innovations byl vytvořen **model pro hodnocení dopadů změn parametrů daňově-dávkového systému** na socioekonomickou situaci rodin s dětmi v České republice. Výzkum byl financovaný Technologickou agenturou České republiky.
- Vytvořena platforma **SmartFleet** umožňující optimalizaci složení a využití vozového parku firem s důrazem na maximální zapojení vozidel s alternativním pohonem (zejména elektrovozidla). Projekt byl podpořený Ministerstvem průmyslu a obchodu.

Laboratoř pro výzkum infrastruktury

Laboratoř se specializuje na vývoj 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.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

doc. Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
16,26 FTE

Významné události

- IT4Innovations se stalo partnerem evropského **Centra excellence MaX** (MAterials design at the eXascale). Hlavní náplní Centra excellence MaX je optimalizace a vývoj vysoce škálovatelných významných komunitních HPC aplikací z oblasti materiálových věd.
- IT4Innovations se stalo partnerem evropského **Centra excellence SPACE** (Scalable Parallel Astrophysical Codes for Exascale). Cílem Centra excellence SPACE je připravit aplikace, které se používají ve výzkumu astrofyziky a kosmologie, na éru exascale superpočítačů.
- Pokračování ve spolupráci s firmami **ELCOM, a. s.** a **ING corporation, spol. s r. o.** v rámci hospodářských smluv.
- Úspěšné dokončení **mezinárodního projektu SCALABLE** zabývajícího se optimalizací akademického a komerčního softwaru pro výpočet CFD.
- Vytvořeny **open-source nástroje**, které umožňují zpracovávat a vizualizovat data ve vysoké kvalitě a podporují jejich prezentaci ve virtuální realitě (VR). Realistické vizualizace (rendering) jsou zastoupeny nástrojem **Bheappe** (code.it4i.cz/raas/bheappe) a **CyclesPhi** (code.it4i.cz/raas/cyclesphi). Nástroj **BHolodeck** (code.it4i.cz/blender/bholodeck) pak umožňuje inspekci 3D scény ve VR více uživatelům současně.
- Spolupráce s Laboratoří modelování pro nanotechnologie na řešení nového projektu „**Propojení holografické a datové bezpečnostní ochrany**“, který je financován TAČR.
- Úspěšné dokončení národního projektu TAČR, na kterém spolupracovalo IT4Innovations společně s firmou **IXPERTA**. Projekt se zabýval vývojem softwarového simulátoru schopného generovat tréninková data pro vývoj systému detekce překážek na železniční trati.
- Mezinárodní spolupráce týkající se energetické efektivity a zapojení v pracovních skupinách „Energy efficiency and sustainability“ v rámci **ETP4HPC** a „Power measurement methodology“ v rámci Energy Efficiency HPC Working Group.
- Rozšíření monitorování výpočetní infrastruktury IT4Innovations a implementace **úsporných opatření** vedoucích ke snížení průměrné spotřeby superpočítače Karolina až o 20 %.

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

Laboratoř je zaměřena primárně na podporu průmyslu. Nabízí kvalitní aplikovaný výzkum v oblasti vývoje škálovatelných algoritmů a HPC knihoven, aplikaci numerického modelování a simulací společně s využitím umělé inteligence, náhradních modelů a digitálních dvojčat v inženýrských aplikacích.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
14,78 FTE

Významné události

- Spolupráce s firmami **NIOB spol.s.r.o.** a **Model Obaly** realizované v rámci hospodářských smluv.
- V roce 2023 byl úspěšně ukončen společný projekt s firmou **Orgrez a.s.** „Výzkum a vývoj aplikačního SW nástroje pro efektivní hodnocení katalytických procesů“ podpořený Ministerstvem průmyslu a obchodu v rámci výzvy Aplikace.
- Byla navázána spolupráce s firmami **MGL s.r.o.** v oblasti vývoje nového produktu pro automotive a **FlowBox s.r.o.** v oblasti vývoje digitálních dvojčat budov.
- Pokračovala dlouhodobá spolupráce s Fraunhofer ICT, která v roce 2023 vyústila v podání společného projektu **FutureMold** do výzvy M-ERA.NET. Projekt byl doporučen k financování a započne v polovině roku 2024.
- Odstartoval tříletý projekt EuroCC2, zajišťující pokračování **Národního centra kompetence pro HPC** (NCK), jímž je v České republice IT4Innovations. Cílem NCK je primárně nabídnout široké portfolio služeb v oblasti HPC, ale také podpořit spolupráci na celoevropské úrovni, posílit technologickou nezávislost a konkurenceschopnost českých firem.
- Titulní stránku magazínu **The Journal of Physical Chemistry B** zdobí obrázek z výzkumu lipidových nanočástic vědců z CATRIN Univerzity Palackého a vědců z Laboratoře modelování pro nanotechnologie a Laboratoře vývoje paralelních algoritmů.
- Vyvinuty výpočetní postupy zaměřené na **řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky**. Tyto postupy byly aplikovány na výpočetní modely rotačních strojů, diskretně řešených pomocí trojrozměrných konečných prvků, za účelem analýzy jejich vibrací.
- Vyvinut **softwarový nástroj** pro efektivní hodnocení katalytických procesů i pro komplexní podporu při návrhu SCR technologií pro průmyslové aplikace. Software je založen na algoritmech strojového učení a výpočtů proudění (CFD). Výzkum byl podpořen Ministerstvem průmyslu a obchodu.

Laboratoř modelování pro nanotechnologie

Laboratoř se zabývá designem, počítačovým modelováním, přípravou a experimentální charakterizací v oblasti pokročilých nanomateriálů a nanotechnologií.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
22,31 FTE

Významné události

- Zahájen projekt Experimentální a teoretické studie luminoforů s chirálními uhlíkovými tečkami emitující blízké infračervené záření pod záštitou programu Moravskoslezského kraje „**Global Experts**“.
- Vizualizace π -děř v molekulách pomocí Kelvinovy sondy silové mikroskopie, pro které byly využity i superpočítače IT4Innovations, publikována v **Nature Communications**.
- Michal Otyepka se podílel na **vývoji nového nanomateriálu**, který okamžitě odhalí antibiotika ve vodě.
- Vědci se podíleli na **vývoji unikátní technologie**, která umožní využít odpad z výroby bionafty a přeměnit jej na užitečné produkty, a zvýšit tak účinnost stávajících biopaliv. Výsledky výzkumu zveřejnil časopis Nature Communications.
- V rámci mezinárodního projektu **s-NEBULA** (Horizont 2020) byl **vyvinut teoretický přístup detekce THz záření** pomocí magnetické složky záření.
- Byly vyvinuty a charakterizovány **terahertzové zdroje využívající spintronické jevy**, jako jsou terahertzové spintronické emitory založené na spin-Hallově jevu a THz zdroje založené na spinovém laseru.
- Vyvinuty **nové produkty v oblasti bezpečnostní holografie**, konkurenceschopné na světových trzích.
- Vědci se podíleli na vývoji nové „**zelené**“ **cesty pro výrobu hematenu**, dvoudimenzionálního materiálu odvozeného od železitého minerálu hematitu s velkým potenciálem pro využití v oblasti čisté energie a v environmentálních aplikacích.
- Byl **vyvinut kód** pro určení magnetostrikčních a magneto-elastických koeficientů v materiálech pomocí kvantově-mechanických výpočtů používajících HPC (**MAELAS 3.0**).
- Dominik Legut se podílel, společně s vědci z Univerzity Karlovy a Akademie věd ČR, na referenční práci ohledně **hydridových aktinoidů** pro časopis Reports on Progress in Physics.
- Nový projekt „**Nové termoelektrické, termovoltaiické a fononelektrické systémy pro konverzi tepla na bázi polovodičů nitridů**“ schválen k financování GAČR. TAČR podpořil projekt „**Propojení holografické a datové bezpečnostní ochrany**“. MPO ČR schválilo k financování projekt „**Spektrometry terahertzové a Ramanovy optické aktivity s rozšířenými aplikačními možnostmi**“.

Laboratoř pro big data analýzy

Laboratoř se zaměřovala na bezpečnost sítí, internet věcí, analýzu velkých objemů dat, zpracování řeči a dále na aplikace umělé inteligence v komplexních systémech. Soustředila se na efektivní metody zpracování a získávání znalostí.

Akademický senát VŠB – Technické univerzity Ostrava na svém zasedání dne 19. prosince 2023 odsouhlasil transformaci Laboratoře pro big data analýzy na Laboratoř kvantových výpočtů.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
2,98 FTE

Významné události

- Ukončení projektu programu Horizont 2020 – **OpenQKD** (Open European Quantum Key Distribution Testbed). V rámci projektu byl vytvořen testbed vysoce zabezpečené sítě využívající pro distribuci klíčů principy kvantové mechaniky. Realizován byl případ užití HPC přes QKD mezi IT4Innovations a PSNC (Poznaň). Dále IT4Innovations spolupracovalo na vývoji a implementaci správy klíčů. Třetí doménou byly simulace realizovaných případů nasazení QKD u všech partnerů v projektu a zároveň vylepšení QKD simulátoru, který je v Ostravě vyvíjen jako open-source. Při simulacích byly využívány výpočetní zdroje IT4Innovations.
V rámci projektu byla v roce 2023 uvolněna další verze simulátoru QKD sítí (open-qkd.eu), která umožňuje dekompozici komponent QKD sítí do vrstev (QKD link, KMS link a QKD uživatel).
- Ukončení projektu **Umělá inteligence a uvažování**, podpořeného MŠMT, který se zabýval metodami umělé inteligence v automatickém uvažování, formální verifikaci teorií a systémů, plánováním a rozvrhováním a jejich průmyslovým použitím, složitými systémy a výpočetní lingvistikou.
- Miroslav Vozňák, jakožto zvaný hlavní přednášející, prezentoval na sympóziu ICUMT v belgickém Ghentu příspěvek Population Mobility Retrieval from Mobile Network. Také na PTV Rail Summit, kde se diskutovalo využití zpracovaných dat o mobilitě obyvatel pro plánování vysokorychlostních tratí, přednášel jako zvaný řečník.



↔ Projekt REFRESH

Projekt REFRESH pod vedením VŠB-TUO získal z operačního programu Spravedlivá transformace dotaci 2,5 miliardy korun. Cílem projektu je reagovat na problémy regionu a přispět k jeho úspěšné hospodářské, energetické i ekologické transformaci. Základem projektu jsou čtyři tzv. živé laboratoře, v nichž se špičkový výzkum provádí v úzkém kontaktu s firmami a veřejnou sférou. IT4Innovations je v projektu zapojeno v rámci živé laboratoře Energy Lab, kde vede spolu s CENETem výzkumný program Výzkum v oblasti digitalizace a transformace energetiky.

6

Vzdělávací a školicí aktivity

IT4Innovations se dlouhodobě podílí na celé řadě vzdělávacích a školicích aktivit. Naši odborníci vyučují studenty VŠB – Technické univerzity Ostrava v magisterských i doktorských studijních programech. V loňském roce jsme v rámci odborného profesního vzdělávání nabídli **33 školení, seminářů a workshopů zaměřených na HPC, HPDA, QC a AI**. Dalších 7 akcí proběhlo v rámci Školicího centra EOSC-CZ, kde IT4Innovations koordinuje vzdělávání široké vědecké komunity v ČR v odborných tématech z oblastí Open Science a FAIR dat.

Vzdělávací aktivity

IT4Innovations společně s Fakultou elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO připravilo a úspěšně akreditovalo doktorský studijní program **Informatika a výpočetní vědy**, který je zaměřen mimo jiné na využití HPC, HPDA a AI ve vědě a průmyslu. V dobíhajícím doktorském studijním programu **Výpočetní vědy** v roce 2023 studovalo 7 studentů a 2 z nich úspěšně zakončili studium.

Odborníci z IT4Innovations se podílí na výuce studentů v magisterském studijním programu **Výpočetní a aplikovaná matematika**. Program je garantován Katedrou

aplikované matematiky Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO. V roce 2022 byl připraven nový předmět **Úvod do kvantového počítání**, který v roce 2023 studovali první studenti Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO.

IT4Innovations je členem mezinárodního konsorcia, které realizuje historicky první celoevropský magisterský studijní program zaměřený čistě na oblast vysoce výkonného počítání – **EUMaster4HPC**. Konsorcium vedené Lucemburskou univerzitou tvoří univerzity, výzkumná a superpočítačová centra. Magisterské studijní programy se rozběhly v zimním semestru 2022 na osmi evropských univerzitách. V roce 2023 započala studium další kohorta studentů a na konci roku 2023 bylo rozhodnuto o třetí kohortě studentů, kteří studium zahájí na podzim roku 2024. Zapojení České republiky do společného evropského podniku EuroHPC umožňuje, aby se ke studiu přihlásili i čeští studenti. Absolventi najdou profesní uplatnění v rychle se rozvíjejících oborech, jako jsou vysoce výkonné počítání, pokročilé datové analýzy nebo umělá inteligence. Tento projekt je součástí širší strategie EuroHPC JU na podporu rozvoje klíčových dovedností a vzdělávání a školení v oblasti HPC pro potřeby evropské vědy a průmyslu.

Školicí aktivity

IT4Innovations podporuje vědeckou komunitu a své uživatele pořádáním kurzů, tutoriálů, workshopů a dalších školicích akcí. Hlavním cílem těchto aktivit je všestranně zvyšovat kompetence uživatelů pro efektivní využívání jedinečné výpočetní infrastruktury IT4Innovations. V širším slova smyslu usiluje IT4Innovations také o zvyšování povědomí a úrovně znalostí v oblasti HPC v celonárodním měřítku, a to pro zájemce nejen z akademické, ale i z komerční sféry. Školicí aktivity mají rovněž celoevropský dosah, jelikož jsou otevřené pro evropskou komunitu v rámci mezinárodních projektů, kterých se IT4Innovations účastnilo a účastní, jako jsou EuroCC 2, IO-SEA a další. Tematicky se kurzy nabízené IT4Innovations zaměřují na počítačové systémy a architekturu, programovací techniky a nástroje, knihovny a aplikace v oblastech HPC, HPDA, AI a nově také na kvantové počítání.

V roce 2023 uspořádalo IT4Innovations **33 vzdělávacích akcí a workshopů**, které navštívilo **873 účastníků**, ať prezenčně či online. Ve srovnání s předchozím rokem se jedná téměř o dvojnásobek počtu nabídnutých akcí. 23 vzdělávacích akcí proběhlo pod hlavičkou Národního centra kompetence pro HPC (projekt EuroCC 2), 5 pod záštitou projektu IO-SEA, 3 v rámci Evropského digitálního inovačního hubu Ostrava (EDIH Ostrava) a také po jednom díky projektům Sctrain a UrbanTEP.

Rozdělení školení dle oblastí

16 HPC 7 AI 7 QC 3 HPDA

V roce 2023 obnovilo IT4Innovations spolupráci s partnery ze Slovenska a Polska na projektu **Superheroes 4 Science**. Tentokrát se partneři zaměří na přípravu zábavných interaktivních vzdělávacích materiálů, které budou nabídnuty učitelům základních a středních škol a pomohou s výukou základních principů kvantového počítání a umělé inteligence. Vzdělávání budoucích generací vědců se věnujeme také pořádáním workshopů **Úvod do kvantového počítání**, kterých se v loňském roce zúčastnilo téměř 100 studentů středních škol.

7

Seznam projektů

Národní projekty

Projekty v oblasti superpočítačových služeb

Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Projekt velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace

e-Infrastruktura CZ (2023–2026)

→ Identifikátor: LM2023054

→ Řešitel projektu: doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

→ e-INFRA CZ je unikátní e-infrastrukturou pro výzkum, vývoj a inovace v ČR. Vytváří komunikační, informační, úložnou a výpočetní platformu pro výzkum, vývoj a inovace jak na národní úrovni ČR tak i mezinárodní úrovni a poskytuje rozsáhlé a ucelené portfolio služeb v oblasti ICT, bez kterých moderní výzkum, vývoj a inovace nemohou být realizovány. Mezi hlavní složky e-INFRA CZ patří: vysoce výkonná národní komunikační infrastruktura, národní gridová a cloudová infrastruktura, nejvýkonnější a nejmodernější superpočítačové systémy ČR a velkokapacitní datová úložiště.

e-INFRA CZ: Modernizace (2020–2023)

→ Identifikátor projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/18_072/0015659

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

→ Cílem projektu byla modernizace a zajištění nezbytných kapacit v rámci konkrétních komponent e-infrastruktury tak, aby úroveň IT infrastrukturní podpory odpovídala predikovaným požadavkům uživatelské komunity pro dané období a zároveň state-of-the-art úrovni oboru.

Modernizace e-INFRA CZ II (2023–2026)

Projekty Operačního programu Jan Amos Komenský

→ Identifikátor projektu: CZ.02.01.01/00/23_016/0008329

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

→ Cílem projektu je modernizace a upgrade e-infrastruktury e-INFRA CZ, která je strategickou infrastrukturou pro výzkum, vývoj a inovace v ČR. Modernizace konkrétních součástí – superpočítače a jejich zázemí.

Projekty v oblasti vědy a výzkumu

Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Projekty Operačního programu Jan Amos Komenský

→ Identifikátor projektu: CZ.02.01.01/00/22_004/0007682

→ Řešitel: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.

→ European Open Science Cloud (EOSC) je evropská iniciativa zaměřená na rozvoj infrastruktury podporující postupy otevřené vědy v oblasti správy výzkumných dat. Nabízí zázemí pro ukládání a zpřístupnění tzv. FAIR výzkumných dat – naležitelných, dostupných, interoperabilních a opětovně využitelných. Projekt EOSC-CZ je implementací iniciativy EOSC v České republice, který si klade za cíl vytvořit národní uzly této evropské iniciativy a podpořit dobrou praxi v oblasti správy výzkumných dat napříč vědeckými komunitami. V rámci implementace Národní datové infrastruktury (NDI) vznikne společná platforma pro sdílení, správu a přístup k datům a výpočetním zdrojům pro výzkumné účely. NDI bude podporovat jak vědecké, tak multidisciplinární výzkumné aktivity a bude zahrnovat širokou škálu vědních oborů a disciplín.

→ www.eosc.cz

Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

Umělá inteligence a uvažování (2017–2023)

→ Identifikátor projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000466

→ Řešitel: prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.

→ Projekt přinesl zásadní opatření pro rozvoj informatického, robotického a kybernetického výzkumu na Českém vysokém učení technickém v Praze. Vybudována byla nová výzkumná skupina Umělá inteligence a uvažování v rámci dotčené součásti Českého institutu informatiky, robotiky a kybernetiky (CIIRC), řešící náročné interdisciplinární úlohy vysoké odborné i společenské priority. Projekt se opíral i o národní partnery (VŠB-TUO a Západočeskou univerzitu v Plzni). Motivace pro jejich zapojení spočívala v důrazu na koncentraci a integraci zdrojů, sdílení znalostí i infrastruktury a v neposlední řadě na vytvoření „sjednoceného prostoru příležitostí“ pro mladé talenty v ČR.

Vývoj nástroje pro zpracování a vizualizaci vědeckých dat ve VR s podporou více uživatelů (2021-2023)

→ Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-008
→ Řešitelka: Ing. Markéta Faltýnková

→ Cílem projektu bylo vytvořit open-source nástroje, které umožní zpracovávat a vizualizovat data ve vysoké kvalitě a budou podporovat jejich prezentaci ve virtuální realitě (VR). Vyvíjené nástroje byly konkrétně zaměřeny na vizualizaci lékařských dat, monitorování běhu superpočítačů a vizualizaci výsledků simulací z paralelních simulačních open-source nástrojů. Hlavním cílem projektu byly vysoce kvalitní vizualizace ve VR. V rámci projektu bylo také aktivováno monitorování spotřeby zdrojů superpočítačů IT4Innovations a jejich vizualizace. Tato funkce, kterou ocení správci i uživatelé těchto systémů, umožňuje navazující výzkum opírající se o získaná data, jako například výzkum plánování úloh s ohledem na spotřebu energie.

Nové zdroje THz záření emitovaného pomocí spintronických jevů (2021-2023)

→ Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-027
→ Řešitel: Ing. Pierre Koleják

→ V rámci projektu byly navrženy, vyvíjeny a charakterizovány terahertzové zdroje využívající spintronické jevy, jako jsou terahertzové spintronické emitory založené na spin-Hallově jevu a THz zdroje založené na spinovém laseru. Pro zvýšení výkonu těchto zařízení byly použity fotonické a plazmonické struktury, včetně Braggovy mřížky a plazmonických materiálů pro spintronické emitory a anizotropní 2D mřížky pro spinové lasery. K popisu spinové hybnosti a širokospektrálních optických vlastností byly použity nekonvenční charakterizační metody, včetně terahertzové spektroskopie v časové doméně a z ní získaných měření na principu „pump-probe“.

Vývoj výpočetních algoritmů pro řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky s využitím numerické knihovny ESPRESO (2021-2023)

→ Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-033
→ Řešitel: Ing. Michal Molčan

→ Cílem projektu bylo vyvinout výpočetní postupy zaměřené na řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky, které byly následně aplikovány na výpočetní modely rotačních strojů, diskretně řešených pomocí trojrozměrných konečných prvků za účelem analýzy jejich vibrací. Postupy byly vytvořeny a studovány na testovacích případech v softwaru MATLAB a následně implementovány v programu ESPRESO (ExaScale PaRallel FETI SOLver), který byl vyvinut v rámci IT4Innovations s otevřeným zdrojovým kódem a testován na reálných průmyslových případech.

Mezinárodní spolupráce ve výzkumu a vývoji

→ Identifikátor projektu: LUASK22099
→ Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.

→ Projekt má za úkol objasnit a vysvětlit roli vlivu rozhraní a teploty na velikost spin-orbitální torzi v heterostrukturách na bázi van der Waalsových 2D materiálů. Uplatněny budou zkušenosti a výpočetní postupy obou partnerů (VŠB-TUO a Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košicích), které se doplňují pro určení termoelektrických jevů a vlivu rozhraní pro experimentálně relevantní 2D systémy pro spin-orbitální torzi.



↔ [Návštěva](#)

V rámci Týdne pro Digitální Česko proběhla v IT4Innovations debata s Ivanem Bartošem, místopředsedou vlády České republiky pro digitalizaci.

Experimentální a teoretické studie luminoforů s chirálními uhlíkovými tečkami emitující blízké infračervené záření (2023–2026)

Projekty podpořené Moravskoslezským krajem
Program Global Experts

→ Identifikátor projektu: 00734/2023/RRC
→ Řešitel: prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

→ Projekt spojuje expertízu specialistů na syntézu uhlíkových teček, kteří se zaměří na přípravu teček s vysokými kvantovými výtěžky emise, zejména v oblasti červeného a blízkého infračerveného světla, a na chirální uhlíkové tečky pro senzorické aplikace. Tyto snahy budou podpořeny nejmodernějšími technikami charakterizace materiálů, které umožní určit složení, strukturní vlastnosti a elektronické a ultra-rychlé optické vlastnosti uhlíkových teček. To se bude odehrávat v úzké spolupráci s teoretickou výpočetní skupinou, která má expertízu v oblasti složitých strukturních modelů širokého spektra fotoluminiscenčních materiálů. Tento projekt slouží jako prostředek k přenosu know-how a přivedení expertízy skupiny profesora Rogache na VŠB-TUO, a to importováním jejich dovedností v oblasti materiálů a jejich charakterizace a vytvořením těsné spolupráce zapojených týmů.

Projekty podpořené Grantovou agenturou České republiky
Mezinárodní grantové projekty hodnocené na principu LEAD Agency

→ Identifikátor projektu: 22-35410K
→ Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.

→ Projekt se bude věnovat studiu a vývoji teorie pro chování koercivity s ohledem na lokální atomovou strukturu (rozhraní, hranice zrn), jejího vlivu na prostorovou variaci magnetických vlastností a mikrostrukturu. Vytvořeno bude unikátní schéma simulačních postupů mezi kvantově-mechanickými výpočty, atomovou spinovou dynamikou a kontinuálními mikromagnetickými simulacemi. Magnetické vlastnosti budou tedy nově brány v potaz již na atomové škále, tj. se zahrnutím defektů atomů na rozhraní a hranic zrn. Nedojde tak k používání zastaralých předpokladů v použití magnetických vlastností z pevných fází. To umožní vybudovat víceškálový model pro určení magnetických vlastností reálných materiálů.

Standardní grantové projekty

→ Identifikátor projektu: 22-22322S
→ Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.

→ V projektu dojde ke společné intenzivní spolupráci experimentátorů (Univerzita Karlova) a teoretiků (VŠB-TUO) v rozsáhlém zkoumání komplexního fázového diagramu sloučeniny UTe_2 a příbuzných sloučenin pomocí doposud nevídané kombinace experimentálního měření a aktuálních teoretických ab initio výpočtů teplotní roztažnosti, magnetostrikce, tepelné kapacity, magnetizace, elastických konstant a elektrického transportu nekonvenčních supravodičů v multiextrémních podmínkách.

Magnetismus na rozhraní: z kvantového do reálného světa (2022–2025)

Nekonvenční supravodiče v extrémních podmínkách (2022–2024)

Nové termoelektrické, termovoltaiické a fononelektrické systémy pro konverzi tepla na bázi polovodičů nitridů (2023–2025)

→ Identifikátor projektu: 23-07228S
→ Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.

→ Tento projekt je zaměřen na vývoj n typových a p typových polovodičů založených na dopovaném ScN a CrN pro aplikace přeměny tepla. Na podporu a doplnění experimentální části bude proveden teoretický výzkum založený na nejmodernějších kvantově mechanických výpočtech teorie funkcionálu hustoty. S využitím výsledků získaných na testovaných materiálech bude nakonec proveden první vývoj p-n přechodů pro přeměnu tepla.

Propojení holografické a datové bezpečnostní ochrany (2023–2025)

Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky
Program TREND

→ Identifikátor projektu: FW06010089
→ Řešitel projektu: doc. Dr. Mgr. Kamil Postava

→ Projekt povede ke zvýšení využití moderních digitálních technologií v nabídce produktů společnosti Optaglio a.s. a tím zlepší její konkurenceschopnost zejména na zahraničních trzích. Cílem je principiálně zamezit možnosti padělání holografických ochranných prvků, a to jejich individuálním propojením s digitální databází. Toto propojení vyžaduje vývoj nových způsobů zápisu zcela náhodného a neopakovatelného motivu, jeho převod do digitální podoby pomocí funkce image hashing, rychlé čtení motivu, nejlépe pomocí běžného mobilního telefonu a následný zápis a porovnání s digitální (de)centralizovanou databází.

Program ÉTA

→ Identifikátor projektu: TL05000184
→ Řešitel: prof. RNDr. Marek Lampart, Ph.D.

Vytvoření modelu pro hodnocení dopadů změn parametrů daňově-dávkového systému na socioekonomickou situaci rodin s dětmi v České republice (2021–2023)

→ Cílem projektu bylo na základě hloubkové a komplexní analýzy socioekonomického postavení českých domácností podle jednotlivých typů domácností, počtu dětí, absolutního a relativního příjmu v kontextu daňově-dávkového systému, vytvořit souhrnnou výzkumnou zprávu a software pro potřeby Ministerstva práce a sociálních věcí v oblasti realizace rodinné politiky. Výstupy hloubkové analýzy slouží jako podkladový materiál pro vytvoření modelu daňově-dávkového systému implementovaného do softwaru, jehož hlavním účelem bude sledovat a vyhodnocovat dopad legislativních změn aktuální české rodinné politiky v oblasti daňově-dávkového systému na socioekonomické postavení konkrétní domácnosti podle jejího příjmu, typu a počtu dětí.

<p>SmartFleet – software na bázi AI pro plnohodnotné využití elektromobilů v podnicích a maximalizaci jejich podílu ve vozovém parku (2021–2023)</p>	<p>Projekty podpořené Ministerstvem průmyslu a obchodu Projekty Operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost</p> <p>→ Identifikátor projektu: CZ.01. 1. 02/0.0/0.0/20_321/0024896 → Řešitel: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.</p> <p>→ Předmětem projektu bylo vytvoření platformy SmartFleet umožňující optimalizaci složení a využití vozového parku firem s důrazem na maximální zapojení vozidel s alternativním pohonem (zejména elektrovozidel). Řešení bylo vyvíjeno jako mezioborové a open – flexibilní, co se týče nových vstupů (např. umístění vodíkových stanic v budoucnu), umožňující iteraci při každé zvažované změně ve vozovém parku a řešící kompletní životní cyklus vozového parku – od plánování nákupu, denního plánování až po online monitoring a reakci na všechny denní změny.</p>
<p>Hologramy s aktivními bezpečnostními prvky (2021–2023)</p>	<p>→ Identifikátor projektu: CZ.01. 1. 02/0.0/0.0/20_321/0024953 → Řešitel: doc. Dr. Mgr. Kamil Postava</p> <p>→ Cílem projektu bylo vyvinout pomocí společného průmyslového výzkumu s firmou Optaglio a.s. nové produkty v oblasti bezpečnostní holografie, které budou konkurenceschopné na světových trzích. Jedná se o zcela nové typy ochranných prvků proti paděláním. Projekt se zaměřil na dva originální přístupy bezpečnostní holografie kombinující vysokou technickou úroveň výroby a pokročilé metody designu nanostruktur.</p>
<p>Výzkum a vývoj aplikačního SW nástroje pro efektivní hodnocení katalytických procesů (2021–2023)</p>	<p>→ Identifikátor projektu: CZ.01. 1. 02/0.0/0.0/21_374/0026707 → Řešitel: Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.</p> <p>→ Cílem projektu bylo vytvoření softwarového nástroje jak pro efektivní hodnocení katalytických procesů, tak pro komplexní podporu při návrhu SCR technologií pro průmyslové aplikace. Výzkumně-vývojové činnosti se zabývaly řešením celkového procesu, jež ovlivňují proces DeNOx redukcí oxidů dusíku ze spalín při reakci s plyným NH₃. SW je založen na algoritmech strojového učení a výpočtů proudění (CFD). SW má přímé komerční využití při řešení snižování emisí dusíku nejen v energetických závodech v ČR, ale i v zahraničí.</p>
<p>Rozvoj, zabezpečení a škálovatelnost cloudových služeb v oblasti digitální transformace (2021–2023)</p>	<p>→ Identifikátor projektu: CZ.01. 1. 02/0.0/0.0/ 20_321/0024591 → Řešitel: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.</p> <p>→ Předmětem projektu byla realizace výzkumných a vývojových aktivit v oblasti cloudu a tiskových řešení. Projekt byl řešen v účinné spolupráci mezi Y Soft Print Management Solutions, a.s., VŠB-TUO a Českým vysokým učením technickým v Praze.</p>

Projekty Operačního programu Technologie a aplikace pro konkurenceschopnost

- Identifikátor projektu: CZ.01. 01. 01/01/2 2_002/0000605
- Řešitel: doc. Dr. Mgr. Kamil Postava

→ Projekt navazuje na úspěšnou, již více než 10letou spolupráci firmy ZEBR s.r.o., Univerzity Palackého a VŠB-TUO, v oblasti vývoje přístroje pro spektrální analýzu látek s využitím detekce jevu Ramanovy optické aktivity (ROA).

Projekty podpořené Ministerstvem vnitra ČR

- Identifikátor projektu: VK01030109
- Řešitel: Ing. Pavel Praks, Ph.D.

→ Projekt spojuje tři výzkumná centra (CVOOZE, SIX a IT4I) a vytváří interdisciplinární řešitelský tým s disponibilním know-how (z oblasti modelování, energetiky, komunikací a vysoce výkonného počítání) zaměřující se na zkoumání provázanosti jednotlivých kritických infrastruktur (řídící, datová a energetická) za účelem posílení odolnosti, robustnosti a připravenosti vůči možným rizikům, hrozbám či dominovými efekty. Výstupy projektu napomůžou porozumět vnitřním a skrytým vzájemným vztahům i jejich možnému negativnímu efektu. Výsledky najdou využití při plánování, optimalizaci a rozšiřování těchto kritických infrastruktur přes zapojené uživatelské organizace z veřejné i privátní sféry. Společensko-vědecký přínos projektu je zaručen otevřeností uvažovaných řešení s dodržením principů otevřené vědy.

Projekty VŠB-TUO, na kterých se podílíme

- Identifikátor projektu: TK02030039
- Řešitel: prof. Ing. Stanislav Mišák, Ph.D. (Centrum ENET, VŠB-TUO)
- Poskytovatel: TAČR

→ Cílem projektu bylo vyvinout nové systémové řešení pro řízení toku energie v energetické platformě komplexního systému Sophisticated Energy System (SEN) na úrovni distribučních sítí pro napájení energetických platforem obcí, měst či mikroregionů. SEN podporuje 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 projektu bylo zajistit připravenost na změnu koncepce řízení energetických soustav po implementaci zimního balíčku (EU Winter Package) v souladu s Národním akčním plánem pro chytré sítě a aktualizovanou Státní energetickou koncepcí.

Spektrometry terahertzové a Ramanovy optické aktivity s rozšířenými aplikačními možnostmi (2023–2025)

Výzkum holistického modelu propojené kritické elektroenergetické a komunikační infrastruktury (2023–2025)

Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí (2019–2023)

→ Identifikátor projektu: CZ.10. 03. 01/00/22_003/0000048
→ Koordinátor za IT4I: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.
→ Poskytovatel: Ministerstvo životního prostředí (Státní fond životního prostředí ČR), Operační program Spravedlivá transformace 2021–2027

→ Projekt REFRESH je klíčovým nástrojem k naplnění strategie SMARAGD, která má přispět k transformaci Moravskoslezského kraje (MSK) na chytrý a zelený region (SMART And Green District). Hlavním cílem projektu REFRESH je vytvořit silný inovační ekosystém MSK ve čtyřech doménách specializace: nová energetika, automatizace a robotika ve výrobě a dopravě, digitalizace, nové materiály a environmentální technologie včetně jejich sociálně-ekonomické dimenze. Tyto domény jsou součástí strategie chytré specializace MSK. Nedílnou součástí projektu REFRESH a současně jeho unikátností je důraz na integraci sociální dimenze do všech řešených aktivit. Individuální i celospolečenská schopnost adaptace v podmínkách dynamického technologického rozvoje totiž podstatně ovlivní celkový příspěvek projektu k transformaci regionu.

→ Identifikátor projektu: VK01020132
→ Řešitel: Ing. Petr Berglowiec (Fakulta bezpečnostního inženýrství, VŠB-TUO)
→ Poskytovatel: Ministerstvo vnitra ČR

→ Projekt se věnuje umělé inteligenci pro příjem tísňových volání. Navazuje na výsledky projektu č. VI20192022169 a jeho cílem je integrace pomocí hlasového chatbota do technologií linky 112 a 150 v ČR (TCTV 112) se zaměřením na využití geolokalizace pro přesňování rozpoznávání řeči a vedení dialogů, kolaborativní chatboty s podporou lidských operátorů při zadávání jmenných entit, detekci témat umožňující přepnutí hovoru na lidského operátora u tématu, který bude mimo kompetenci chatbota, a identifikaci jazyka. Projekt bude rovněž zkoumat interakci lidských operátorů s automatickými ve scénářích verifikace a lidské supervize jednoho či více voicebotů. Projekt se primárně věnuje hlasové komunikaci, ale i tísňovým SMS zprávám. Jeho výstupem budou dva softwarové demonstrátory.

Mezinárodní projekty

DICE – Data Infrastructure Capacity for EOSC (2021–2023)

Projekty v oblasti superpočítačových služeb

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

→ Identifikátor projektu: 101017207 (H2020-INFRAEOSC-2018-2020, RIA)
→ Řešitel: Ing. Filip Staněk

→ Konsorcium projektu propojilo síť výpočetních a datových center, výzkumných infrastruktur a datových úložišť s cílem vytvořit evropskou infrastrukturu pro EOSC v oblasti správy dat a jejich ukládání, která výzkumné komunitě poskytuje standardní služby a základní moduly pro ukládání, vyhledávání, přístup a zpracování dat konzistentním a trvalým způsobem. → www.dice-eosc.eu

Projekty v oblasti vědy a výzkumu

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

→ Identifikátor projektu: 956137 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-IA)
→ Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

→ Snahou projektu je integrace a společný návrh prvotřídních evropských aplikací s otevřeným zdrojovým kódem společně s patentovanými IP s cílem udržet celosvětové vedoucí postavení Evropy v oblasti řešení CADD (Computer-Aided Drug Design neboli počítačový návrh léčiv) využívajících dnešní špičkové superpočítače a budoucí exascalové systémy, a tím i podporovat evropskou konkurenceschopnost v této oblasti. Plně integrované řešení navrhované v rámci projektu LIGATE umožní co nejrychleji a s nejvyšší přesností dosáhnout reálného výsledku procesu návrhu léků a dále provádět automatické ladění parametrů řešení tak, aby odpovídala časovým a zdrojovým omezením. → www.ligateproject.eu

LIGATE – Ligand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale (2021–2024)

EVEREST – dEsign enVironmEnt foR Extreme-Scale big data analyTics on heterogeneous plat- forms (2020–2024)

→ Identifikátor projektu: 957269 (H2020-ICT-2018-20 / H2020-ICT-2020-1)
→ Řešitelka: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.

→ Projekt vyvíjí celostní přístup navrhování výpočtů a komunikace ve špičkovém a především bezpečném systému pro vysoce výkonné datové analýzy. Tohoto cíle bude dosaženo zjednodušením programovatelnosti různorodě rozšířených architektur pomocí přístupu řízeného daty, využitím hardwarově zrychlené umělé inteligence a díky efektivnímu monitorování spouštění úloh dle unifikovaného konceptu spojujícího hardwarový a softwarový návrh. Projekt ověří svůj přístup prostřednictvím třech případových studií, a to u predikčního modelu založeného na analýze počasí, v aplikaci pro monitorování kvality ovzduší a ve frameworku pro modelování dopravy u smart cities. → www.everest-h2020.eu



↔ LUMI

Česká výzkumná komunita počítá nejen na superpočítačích provozovaných v IT4Innovations, ale od konce roku 2021 i na superpočítači LUMI, který byl instalován ve finském Kajaani. Díky členství IT4Innovations v konsorciu LUMI, které tvoří deset evropských zemí, mají čeští vědci přístup k jednomu z nejvýkonnějších a nejmodernějších superpočítačů světa, jehož špičkový teoretický výkon v roce 2023 dosáhl 531,5 PFlop/s.

**ACROSS – HPC big data
artificial intelligence cross stack
platform toward
exascale (2021–2024)**

→ Identifikátor projektu: 955648 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-IA)
→ Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

→ Projekt navrhuje a rozvíjí konvergenční platformu na bázi vysoce výkonného počítání (HPC), big data (BD) a umělé inteligence (AI), která bude podporovat aplikace v oblastech letectví, klimatu a počasí a energetiky. Za tímto účelem bude projekt nejenom těžit z další generace pre-exascalových superpočítačů a účinných mechanismů pro snadné popsání a řízení komplexních workflows ve zmíněných vědeckých oblastech, ale bude dále připravena pro využití na exascalových systémech. V rámci projektu se kombinují tradiční HPC metody s analytickými AI (konkrétně machine learning/deep learning) a BD metodami za účelem zlepšení výsledků dosažených při testování aplikací. → www.acrossproject.eu

**s-NEBULA – Novel
Spin-Based Building
Blocks for Advanced
TeraHertz Applications
(2020–2023)**

→ Identifikátor projektu: 863155 (H2020-FETOPEN-2018-2020, RIA)
→ Řešitel: doc. Dr. Mgr. Kamil Postava

→ Projekt se zaměřil na výzkum a vývoj revolučního přístupu k technologiím terahertzového (THz) záření na bázi spinu jak pro generování, tak pro detekci THz záření. Záměrem projektu bylo vyvinout platformu pro nové THz technologie využívající spinových vlastností elektronu při pokojové teplotě, které jsou založené na inovativním spojení magnetismu a optiky. Cílem projektu bylo poskytnout špičková řešení složitých vědeckých problémů v oblasti technologií využívajících THz záření motivovaných jednoznačnými potřebami v uvážlivě zvolených cílových aplikacích. → www.s-nebula.eu

**SCALABLE – SCALable
Lattice Boltzmann
Leaps to Exascale
(2021–2023)**

→ Identifikátor projektu: 956000 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-IA)
→ Řešitel: Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

→ Projekt spojil významné průmyslové a akademické partnery za účelem zvýšení výkonu, škálovatelnosti a energetické účinnosti průmyslového softwaru pro výpočty dynamiky tekutin (Computational Fluid Dynamics, CFD) na bázi metody Lattice-Boltzman (LBM), která představuje spolehlivou alternativu ke konvenčním CFD přístupům. Obecně je LBM vhodná pro využití pokročilých superpočítačových architektur, jelikož umožňuje masivní paralelizaci. Projekt měl přímý dopad na evropský průmysl a zároveň přispěl k základnímu výzkumu. → www.scalable-hpc.eu

**IO-SEA – IO Software
for Exascale Archi-
tecture (2021–2024)**

→ Identifikátor projektu: 955811 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-RIA)
→ Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

→ Cílem projektu je poskytnout novou platformu pro správu a ukládání dat pro potřeby exascalových výpočtů založenou na hierarchické správě úložiště a poskytování služeb ukládání dat na vyžádání. Platforma bude efektivně využívat vrstvy úložiště sahající od NVMe a NVRAM až po páskové technologie. V projektu budou vyvinuty pokročilé instrumentační a monitorovací funkce IO, které využijí nejnovějších poznatků v oblasti umělé inteligence a strojového učení k systematické analýze telemetrických záznamů za účelem chytrého rozhodování týkajícího se umístění dat. → www.iosea-project.eu

OPENQKD – Open European Quantum Key Distribution Testbed (2019–2023)

→ Identifikátor projektu: 857156 (H2020-SU-ICT-2018-2020)
→ Řešitel: prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.

→ Cílem projektu bylo vytvořit testbed vysoce zabezpečené sítě využívající pro distribuci klíčů principy kvantové mechaniky. Jednalo se o dosud nejrozsáhlejší nasazení QKD (Quantum Key Distribution) v Evropě. Role IT4Innovations byla především ve třech oblastech. První byla realizace případu užití HPC přes QKD mezi IT4Innovations a PSNC (Poznaň). Druhou oblastí byla participace na vývoji a implementaci správy klíčů. Třetí doménou byly simulace realizovaných případů nasazení QKD u všech partnerů v projektu a zároveň vylepšení QKD simulátoru, který je v Ostravě vyvíjen jako open-source. Při simulacích byly využívány výpočetní zdroje IT4Innovations.
→ www.openqkd.eu

EUPEX – European Pilot for Exascale (2022–2026)

→ Identifikátor projektu: 101033975 (H2020-JTI-EuroHPC-2020-01,RIA)
→ Řešitel: doc. Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

→ Konsorcium projektu si klade za cíl navrhnout, vybudovat a ověřit první platformu Evropské unie pro vysoce výkonné počítání (HPC), která pokryje celé spektrum požadovaných technologií s evropskými aktivy: od architektury, procesoru, systémového softwaru, vývojových nástrojů až po aplikace. Prototyp EUPEX bude navržen tak, aby byl otevřený, škálovatelný a flexibilní, včetně modulární platformy vyhovující OpenSequana a odpovídajícího softwarového ekosystému HPC pro modulární superpočítačovou architekturu. Z vědeckého hlediska je EUPEX prostředkem k přípravě komunit v oblasti HPC, AI a big data na nadcházející evropské systémy a technologie exascale. → www.eupex.eu

Projekty 9. rámcového programu EU pro výzkum a inovace – Horizont Evropa

BioDT – Biodiversity Digital Twin for Advanced Modelling, Simulation and Prediction Capabilities (2022–2025)

→ Identifikátor projektu: 101057437 (HORIZON-INFRA-2021-TECH-01,RIA)
→ Řešitel: Ing. Tomáš Martinovič, Ph.D.

→ 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. Vědci budou moci využít BioDT k lepšímu pozorování změn v biodiverzitě, spojování těchto změn s možnými příčinami a lepší předpovědi účinků změn na základě vlivů na tyto příčiny buď klimatem nebo lidským zásahem. Konsorcium sdružuje dynamický tým odborníků na biodiverzitu, vysoce výkonné počítače a umělou inteligenci.
→ bioldt.eu

OpenWebSearch.EU – Piloting a Cooperative Open Web Search Infrastructure to Support Europe’s Digital Sovereignty (2022–2025)

→ Identifikátor projektu: 101070014 (HORIZON-CL4-2021-HUMAN-01, RIA)
→ Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

→ V projektu si 14 renomovaných evropských výzkumných a superpočítačových center dalo za cíl vytvořit otevřenou evropskou infrastrukturu pro webové vyhledávání. Tento projekt přispěje k digitální suverenitě Evropy a zároveň podpoří otevřený trh s aplikacemi využívajícími webové vyhledávání. Během tří let výzkumníci vybudují jádro evropského otevřeného webového indexu jako základ pro nové internetové vyhledávání v Evropě. Kromě toho projekt položí základy otevřené a rozšiřitelné evropské infrastruktury pro otevřené vyhledávání a analýzu webu, založené na evropských hodnotách, zásadách, právních předpisech a standardech.
→ openwebsearch.eu

EXA4MIND – Extreme Analytics for Mining Data spaces (2023–2025)

→ Identifikátor projektu: 101092944 (HORIZON-CL4-2022-DATA-01, RIA)
→ Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

→ Projekt vytvoří platformu pro extrémně objemná data, která propojí datová úložiště a superpočítače zavedením nových metod automatické správy dat a jejich efektivního přenosu a ukládání. Jádrem projektu jsou čtyři aplikace z oblastí molekulární dynamiky, pokročilých asistenčních systémů pro řidiče, inteligentního zemědělství/vinařství a velkých dat ve zdravotnictví a společnosti. Projekt předkládá inovativní řešení složitých problémů při každodenním zpracování dat s využitím pokročilé datové analýzy, strojového učení a umělé inteligence a díky tomu chce zjednodušit využívání superpočítačových center v EU pro aplikace pracující s extrémním objemem dat. → www.exa4mind.eu

SPACE – Scalable Parallel and distributed Astrophysical Codes for Exascale (2023–2026)

→ Identifikátor projektu: 101093441 (HORIZON-EUROHPC-JU-2021-COE-01)
→ Řešitel: doc. Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

→ V astrofyzice a kosmologii jsou numerické simulace využívající vysoce výkonné počítání (HPC) klíčovými nástroji pro vědecké objevy. Představují základní nástroje pro teoretické experimenty schopné chápat fyzikální procesy za hranicemi pozorovatelného, pro které je zásadní efektivní využívání budoucích exascale superpočítačů. Tyto systémy ale mají komplikovanou architekturu s významným dopadem na strukturu simulačních kódů. 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. → www.space-coe.eu

MaX – MAterials design at the eXascale (2023–2026)

→ Identifikátor projektu: 101093374 (HORIZON-EUROHPC-JU-2021-COE-01)
→ Řešitel: doc. Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

→ Materiálové simulace se staly jednou z nejintenzivnějších a nejrychleji rostoucích oblastí pro vysoce výkonné počítání na celém světě, přičemž Evropa je uznávaným lídrem ve vývoji a inovaci ekosystému kvantových simulačních kódů. 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.
→ www.max-centre.eu

DTO-BioFlow – Integration of biodiversity monitoring data into the Digital Twin Ocean (2023–2027)

→ Identifikátor projektu: 101112823 (HORIZON-MISS-2022-OCEAN-01, IA)
→ Řešitel: Ing. Tomáš Martinovič, Ph.D.

→ Primárním cílem projektu je probudit tzv. spící data o biologické rozmanitosti, a umožnit bezproblémovou integraci stávajících i nových údajů do evropského digitálního dvojčete oceánu. 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. Projekt chce zlepšit evropské datové prostředí zaměřené na biodiverzitu zefektivněním toku FAIR dat z různých zdrojů do úložišť digitálních dvojčat, optimalizací a posílením funkčnosti a společenské hodnoty digitálního dvojčete oceánu. → dto-bioflow.eu

Program Digitální Evropa

EUROCC2 – National Competence Centres in the Framework of EuroHPC Phase 2 (2023–2025)

→ Identifikátor projektu: 101101903 (DIGITAL-EUROHPC-JU-2022-NCC-01)
→ Řešitel: Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

→ Posláním EuroCC 2 je co nejeftivnějším způsobem pokračovat ve vytváření sítě národních center kompetence a zároveň i nadále podporovat efektivní způsob rozšíření vysoce výkonného počítání (HPC) v Evropě. Hlavním úkolem je využít zkušeností a odborných znalostí z oboru HPC, což představuje odrazový můstek pro hlavní cíl: podporu národních center kompetence při vytváření jejich individuálních operačních rámců, rozvíjení další spolupráce, resp. výměnu zkušeností a urychlení procesu zvyšování kompetencí na národní a celoevropské úrovni. → www.eurocc-access.eu

CZQCI – Czech National Quantum Communication Infrastructure (2023–2026)

→ Identifikátor projektu: 101091684 (DIGITAL-2021-QCI-01, DIGITAL Simple Grants)
→ Řešitel: doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

→ Díky projektu bude v ČR zavedena kvantová komunikační infrastruktura (QCI). Bude navržen a vyvinut výukový program, který připraví uživatele a odborníky ze všech odvětví na využívání budoucích kvantových komunikačních infrastruktur. Infrastruktura a odborné znalosti získané díky projektu umožní testovat pokročilé způsoby komunikace mezi orgány veřejné správy a uživateli z průmyslu, testovat provozní požadavky z hlediska dlouhých vzdáleností a času a testovat QKD a síťové komponenty. Velmi náročná testovací cvičení připraví cestu k plošnému nasazení QCI. Projekt významně přispěje ke zvýšení kybernetické bezpečnosti v Evropě prostřednictvím propagace a zavedení evropských kvantových komunikačních technologií.

EDIH Ostrava – Evropský digitální inovační hub Ostrava (2023–2025)

→ Identifikátor projektu: 101083551 (DIGITAL-2021-EDIH-01)
→ Řešitel: Mgr. Martin Duda

→ Posláním Evropského digitálního inovačního hubu Ostrava (EDIH Ostrava) je podpora zavádění a využívání pokročilých digitálních technologií ve firmách i ve společnosti. EDIH Ostrava nabízí své služby za velmi zvýhodněných dotovaných podmínek, případně zdarma. EDIH Ostrava vznikl spojením aktivit IT4Innovations, Fakulty elektrotechniky a informatiky, které jsou součástí VŠB-TUO, a Moravskoslezského inovačního centra Ostrava. → www.edihostrava.cz

Projekty v oblasti vzdělávání

Erasmus+ projekty

→ Identifikátor projektu: 20-203-075975 (KA203-6E6A1FFC)
→ Řešitel: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

→ Posláním projektu byl metodický přístup k doplnění mezer v současných vysokoškolských kurzech a zvýšení povědomí o HPC pro budoucí odborníky v oblasti věd a techniky. → sctrain.eu

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

Sctrain – Supercomputing knowledge partnership (2020–2023)

EUMaster4HPC – European Master for High Performance Computing (2022–2025)

→ Identifikátor projektu: 101051997 (H2020-JTI-EuroHPC-2020-03, CSA)
→ Řešitel: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

→ Konsorcium univerzit, výzkumných a superpočítačových center, průmyslových partnerů a dalších spolupracujících institucí má za cíl zahájit magisterské studijní programy na osmi evropských univerzitách. Tato aktivita je součástí širší strategie EuroHPC JU na podporu rozvoje klíčových dovedností a vzdělávání a školení v oblasti vysoce výkonného počítání pro potřeby evropské vědy a průmyslu.

→ eumaster4hpc.uni.lu

Mezinárodní visegrádský fond

Superheroes 4 Science (2023–2025)

→ Identifikátor projektu: 22320170 (Mezinárodní visegrádský fond)
→ Řešitel: Ing. Karina Pešatová, MBA

→ Projekt má v plánu seznámit mladou generaci s vysoce výkonným počítáním (HPC), což je klíčová technologická oblast, jejíž podstatou je využití superpočítačů k řešení složitých problémů a výpočetně náročných úloh. Cílem projektu je vytvořit interaktivní vzdělávací materiály o HPC a dvou souvisejících rozvíjejících se oborech: umělé inteligenci a kvantovém počítání. → superheroes4science.eu

Seznam zkratek

AI	Umělá inteligence (Artificial Intelligence)
AIOPEN	Projekt Evropské kosmické agentury
ACROSS	HPC big data artificial intelligence cross stack platform towards exascale
BD	Big data, velká data
BDVA	Big Data Value Association
BioDT	Biodiversity Digital Twin for Advanced Modelling, Simulation and Prediction Capabilities
CATRIN	Czech Advanced Technology and Research Institute
CEET	Centrum energetických a environmentálních technologií
DICE	Data Infrastructure Capacity for EOSC
DOI	Unikátní mezinárodní identifikátor digitálního objektu v elektronickém prostředí (Digital Object Identifier)
DTO-BioFLOW	Integration of biodiversity monitoring data into the Digital Twin Ocean
DT4REGIONS	Evropská iniciativa podporující využití AI ve veřejné správě
EDIH Ostrava	Evropský digitální inovační hub Ostrava
e-INFRA CZ	e-infrastruktura pro výzkum a vývoj v České republice
EOSC	European Open Science Cloud
ESA	Evropská vesmírná agentura (European Space Agency)
ETP4HPC	European Technology Platform for High-Performance Computing
EUDAT CDI	EUDAT Collaborative Data Infrastructure
EUMaster4HPC	Magisterský studijní program zaměřený na oblast vysoce výkonného počítání (European Master For High Performance Computing)
EUPEX	EUropean Pilot for EXascale
EUROCC	National Competence Centres in the framework of EuroHPC
EuroHPC JU	Celoevropský společný podnik EuroHPC
EVEREST	design environment for Extreme-Scale big data analytics on heterogeneous platforms
EXA4MIND	EXtreme Analytics for MINing Data spaces
ExaQUte	Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation
Fiji	Fiji Is Just ImageJ
Flop/s	Počet operací v plovoucí řádce za sekundu
FP7	7. rámcový program pro výzkum a technologický rozvoj (Seventh Framework Programme)
FTE	Ekvivalent plné pracovní doby (Full-Time Equivalent)
GAČR	Grantová agentura České republiky
GPU	Grafický procesor (Graphics Processing Unit)
H2020	Horizont 2020
HPC	Vysoce výkonné počítání (High-Performance Computing)
HPDA	Vysoce výkonné datové analýzy (High Performance Data Analytics)
ICT	Informační a komunikační technologie
IF	Impakt faktor, ukazatel, který reflektuje kvalitu vědeckých publikací
IO-SEA	IO Software for Exascale Architecture
iRODS	Integrated Rule-Oriented Data System
LEXIS	Large-scale Execution for Industry & Society
LIGATE	Ligand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale
LUMI	Large Unified Modern Infrastructure
LUMI-C	Část superpočítače LUMI využívající pouze CPU uzly
LUMI-G	GPU akcelerovaná část LUMI

LUMI-Q	Large Unified Modern Infrastructure for Quantum Computing
MaX	Materials design at the exascale, Evropské centrum excellence
MPI	Message Passing Interface, programovací model
MPO	Ministerstvo průmyslu a obchodu
MSK	Moravskoslezský kraj
MŠMT	Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy České republiky
MV	Ministerstvo vnitra České republiky
OPENQKD	Open European Quantum Key Distribution Testbed
POP3	Performance Optimisation and Productivity 3, Evropské centrum excellence
PRACE	Partnership for Advanced Computing in Europe
PRACE-6IP	Partnership for Advanced Computing in Europe, 6. implementační fáze
QKD	Výměna kvantových klíčů (Quantum Key Distribution)
SCALABLE	SCALable Lattice Boltzmann Leaps to Exascale
SCtrain	Supercomputing Knowledge Partnership
s-NEBULA	Novel Spin-Based Building Blocks for Advanced TeraHertz Applications
SPACE	Scalable Parallel Astrophysical Codes for Exascale, Evropské centrum excellence
SW	Software
TAČR	Technologická agentura České republiky
THz záření	Terahertzové záření
VaV	Výzkum a vývoj
VaVal	Výzkum, vývoj a inovace
VR	Virtuální realita
VŠB-TUO	Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava



**VŠB – TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA**

**IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM**

www.it4i.cz

© IT4Innovations národní superpočítačové centrum Ostrava 2024

Poštovní adresa

VŠB – Technická univerzita Ostrava
17. listopadu 2172/15
708 00 Ostrava

E-mail info@it4i.cz

Tel. +420 597 329 500

Adresa

IT4Innovations národní superpočítačové centrum
Studentská 6231/1b
708 00 Ostrava

Tato publikace byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy z účelové podpory projektu Velké výzkumné infrastruktury „e-INFRA CZ - LM2023054“.



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY