

Využití HPC pro analýzu velkých dat a pro náročné výpočty

Inovace v ICT



**SLEZSKÁ
UNIVERZITA**

OBCHODNĚ PODNIKATELSKÁ
FAKULTA V KARVINĚ

Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.

**IT4Innovations,
Národní superpočítačové centrum
VŠB – Technická univerzita Ostrava**

VSB TECHNICAL UNIVERSITY OF OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NATIONAL SUPERCOMPUTING CENTER

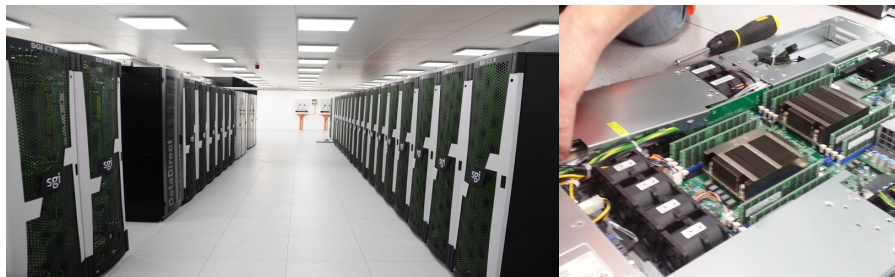
Obsah přednášky

- **Superpočítače**
- **Porovnání výkonnosti počítačů**
- **HPC a práce s velkými daty v Evropě**
 - EuroHPC JU
 - ETP4HPC
 - BDVA/DAIRO
 - EOSC
 - Gaia-X
 - Data spaces
- **Trendy využití HPC v Evropě a ve světě**
- **Velké výzkumné infrastruktury v ČR a HPC – e-Infra.cz**
 - CESNET
 - CERIT-SC
 - IT4Innovations
- **IT4Innovations národní superpočítačové centrum**

Superpočítače

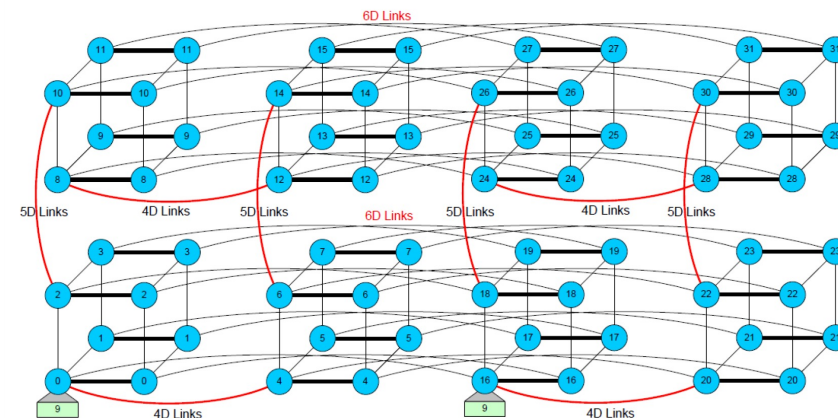
High performance computing (HPC), výpočetní výkon, paralelizace

Superpočítače



- Vysoce výkonné počítače, počítače určené pro řešení výpočetně náročných úloh
- Propojení více výpočetních uzlů (obsahujících více výpočetních jader)
- Velmi rychlá komunikační síť (např. Infiniband, až 200 GB/s)
- Různé typy uzlů (login uzly, výpočetní uzly)

HPC = High Performance Computing – vysoce výkonné počítání



Využití superpočítačů - paralelizace

Návrh software nebo systému tak, aby fungoval paralelně a mohl využít výpočetní kapacity

Cíl: paralelní využití výpočetních uzlů a jader

- **Různé druhy paralelizace**

- Z pohledu algoritmu
 - Řešení náročných úloh lze rozdělit na menší úlohy
 - Speciální úprava algoritmů (sekvenční vs paralelní přístup)
- Z pohledu komunikace
 - Práce s velkými daty nebo náročné úlohy vyžadující komunikaci mezi výpočetními uzly
- Z pohledu množství zpracovaných dat
 - Sdílení dat mezi výpočetními uzly (rychlé propojení)

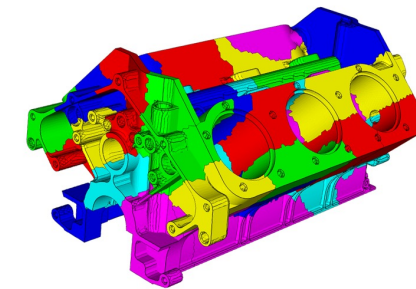
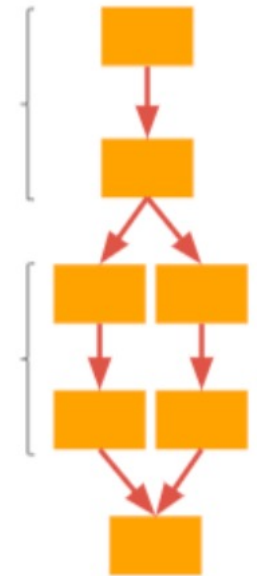
Typy přístupů

Sekvenční



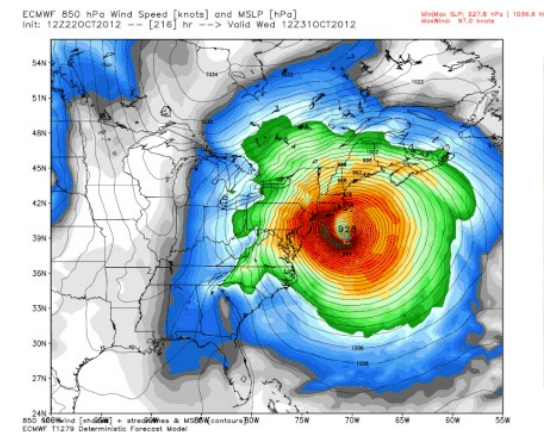
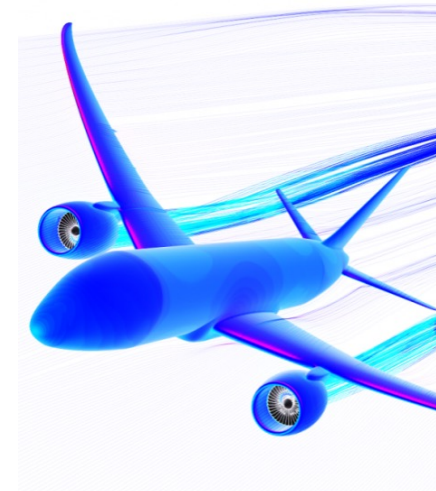
Sekvenční

Paralelní



Příklady úloh pro superpočítače

- Střednědobá a dlouhodobá předpověď počasí, modelování klimatických změn
- Bioinformatika, vývoj nových léčiv, analýza DNA sekvencí, modelování proteinů
- Zpracování velkých dat, využití pro strojové učení, umělou inteligenci (např. velké jazykové modely LLM)
- Virtuální realita, rendering videa, zpracování obrazu
- Matematické a fyzikální výpočty, materiálové inženýrství (nové materiály)
- Simulace v různých odvětvích (CFD)
- Digitální dvojčata (digital twins), např. model lidského mozku, model země
- Kvantové počítání, atd.



Škálovatelnost - hardware

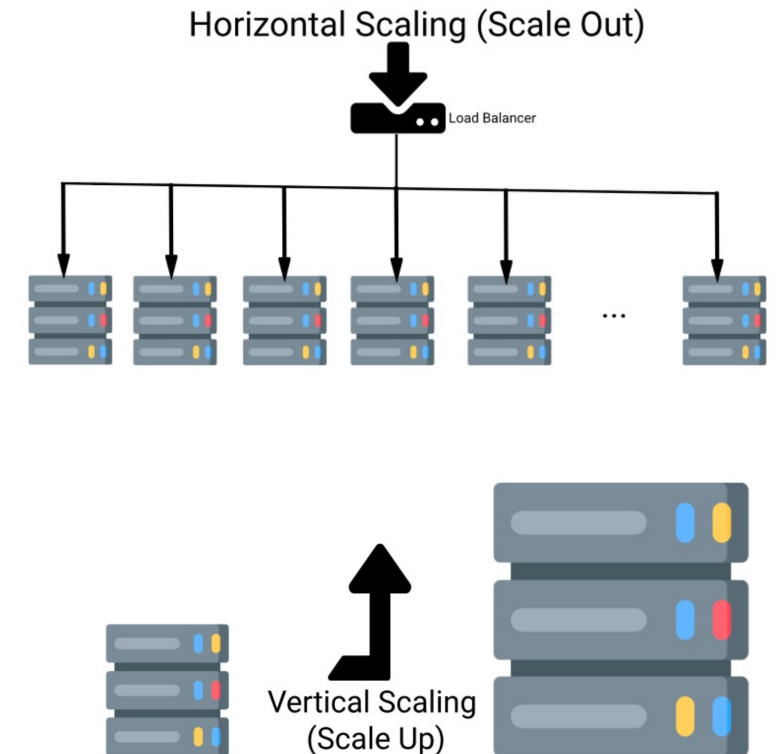
Schopnost systému zvládnout rostoucí požadavky na výkon za zvýšeného zatížení (nebo klesající nároky na výkon systému).

- **Horizontální škálování (scale out)**

- Zvýšení kapacity stávajícího HW, který funguje jako jeden logický celek
- Přidání dalších serverů, počítačů, výpočetních uzlů
- Není omezení z hlediska HW
- Např. nárůst uživatelů

- **Vertikální škálování (scale up)**

- Zvyšování výkonnosti serveru, počítače, výpočetního uzlu
- Např. přidání procesorů, paměti, disků, výkonnější grafické karty, atd.
- Většinou urgentní případy, kdy je potřeba rychle reagovat
- Omezení daná používaným HW



Škálovatelnost - software

Schopnost software přizpůsobit svou kapacitu a funkčnost na základě měnících se uživatelských požadavků (obvykle na výkon a zatížení).

- Software reaguje pružně při změně zátěže (je alokováno větší/menší množství zdrojů)
- Obvykle dynamická alokace
- Důležitý návrh efektivního kódu s ohledem na škálovatelnost, údržbu, pružnost
- Výběr vhodného algoritmu (výkonnost, prostorová složitost)
- Lepší management paměti (garbage collection)
- Pečlivý výběr použitých knihoven (výkonnost)
- Asynchronní přístup, kde je to vhodné (vyřízení neurgentních požadavků na pozadí)
- Využívání bezstavových transakcí (vyhnout se sdílení dat mezi požadavky)
- Efektivní správa lokálních souborů – využívat na to vhodné prostředky (speciální úložiště k tomu určená)
- Přesun některých server-side sessions na stranu klienta (cookies)
- Umístění aplikací a dat potřebných pro zpracování z pohledu heterogenních systémů (efektivnější komunikace)
- Vertikální vs. horizontální škálovatelnost (přidání HW)
- No SQL databáze (Cassandra, MongoDB, HDF5 a další)
- Využívání cache, data pre-fetching (memoization, burst buffers atd.)

HPC vs Cloud vs Grid

Cloud computing

- Dříve typické Horizontální škálování
- Dynamické přizpůsobení výpočetních zdrojů podle požadavků zákazníka (např. Kubernetes)
- Typické úlohy, kdy jednu úlohu je možné rozdělit na mnoho menších úloh
- Snadno paralelizovatelné problémy (embarasingly parallel) - téměř žádná závislost nebo nutnost komunikace mezi paralelními úlohami nebo výsledky

Grid computing (distribuované výpočty)

- více počítačů v síti
- na jednom místě nebo distribuovaná na několika místech
- Snadno paralelizovatelné problémy (embarasingly parallel)

HPC

- Dříve typické Vertikální škálování
- Extrémně velké výpočty, paralelizace řešených problémů
- Typické sdílení dat mezi výpočetními uzly, sdílená paměť
- Speciální architektury, velmi rychlé propojení mezi výpočetními uzly (Infiniband)

Vývoj specializovaného SW umožňujícího snadnější přístup k HPC infrastruktuře

- **HPC in a Cloud** (AWS, Google Cloud, Microsoft Azure, IBM Spectrum Computing, a další)
- **HPC as a Service** (Eviden, Cray, HPE, IT4I a další)

Propojování HPC a Cloudu

- High-performance computing clouds
- Federated HPC

Porovnávání výkonnosti superpočítačů

Srovnávací testy, žebříčky

Výkon superpočítačů

- **Výpočetní výkon**
 - **Jednotka Flop/s** (Floating-point Operations Per Second)
 - počet operací v pohyblivé řádové čárce za sekundu
 - Současný výkon superpočítačů je v rozsahu PFlop/s -> EFlop/s

| Prefix | Symbol | Násobek | Exponent |
|------------|----------|----------------------------------|-----------------------------|
| kilo | k | 1 000 | 10^3 |
| mega | M | 1 000 000 | 10^6 |
| giga | G | 1 000 000 000 | 10^9 |
| tera | T | 1 000 000 000 000 | 10^{12} |
| peta | P | 1 000 000 000 000 000 | 10^{15} |
| exa | E | 1 000 000 000 000 000 000 | 10^{18} |

Porovnávání výkonnosti počítačů

- **Srovnávací testy (benchmarks)**

- Testy s dobře popsanou dokumentací tak, aby byly zopakovatelné s porovnatelnými výsledky
- Dokumentace obsahuje také podmínky nebo pravidla pro spouštění testů a pro záznam výsledků
 - čas trvání testu
 - konfigurace systému
 - verze použitých knihoven
 - počet výpočetních jader
 - topologie sítě, atd.
- I když bývají specifické, jsou obvykle používány pro vyvození obecných závěrů k chování systému

- **Metodiky pro srovnávání výkonnosti počítačů**

- Mezinárodní žebříčky pro srovnávání, pravidelná aktualizace (např. TOP500)
- Účast v žebříčkách nepovinná, přesto však prestižní



Porovnávání výkonnosti počítačů – TOP500



- **Neznámější metodika pro měření výkonnosti počítačů (od roku 1993)**
- <https://www.top500.org>
- **Výsledky 2x ročně zveřejňovány na předních světových konferencích zaměřených na superpočítače**
 - Červen: ISC High Performance (Německo) - <https://www.isc-hpc.com>
 - Listopad: Supercomputing, SC (USA) - <https://supercomputing.org>
- **LINPACK Benchmark (High Performance Linpack, HPL Benchmark), HPCG**
 - Neřeší celkovou výkonnost daného systému, ale řeší často se vyskytující typ problému, a to vyřešení hustého systému lineárních rovnic
 - Algoritmus veřejně dostupný, je možné jej optimalizovat přímo na daný typ výpočetní infrastruktury
- **Země s nejvýkonnějšími počítači:**
 - USA
 - Japonsko
 - Evropa -> Finsko, Itálie
 - Čína

Zdroj: LINPACK Benchmark. <https://www.top500.org/project/linpack/>

Porovnávání výkonnosti počítačů – TOP500 - svět



Listopad 2023

| Rank | System | Cores | Rmax (PFlop/s) | Rpeak (PFlop/s) | Power (kW) |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|----------------|-----------------|------------|
| 1 | Frontier - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States | 8,699,904 | 1,194.00 | 1,679.82 | 22,703 |
| 2 | Aurora - HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States | 4,742,808 | 585.34 | 1,059.33 | 24,687 |
| 3 | Eagle - Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Microsoft Azure United States | 1,123,200 | 561.20 | 846.84 | |
| 4 | Supercomputer Fugaku - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan | 7,630,848 | 442.01 | 537.21 | 29,899 |
| 5 | LUMI - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland | 2,752,704 | 379.70 | 531.51 | 7,107 |

| Rank | System | Cores | Rmax (PFlop/s) | Rpeak (PFlop/s) | Power (kW) |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|----------------|-----------------|------------|
| 6 | Leonardo - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, EVIDEN EuroHPC/CINECA Italy | 1,824,768 | 238.70 | 304.47 | 7,404 |
| 7 | Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States | 2,414,592 | 148.60 | 200.79 | 10,096 |
| 8 | MareNostrum 5 ACC - BullSequana XH3000, Xeon Platinum 8460Y+ 40C 2.3GHz, NVIDIA H100 64GB, Infiniband NDR200, EVIDEN EuroHPC/BSC Spain | 680,960 | 138.20 | 265.57 | 2,560 |
| 9 | Eos NVIDIA DGX SuperPOD - NVIDIA DGX H100, Xeon Platinum 8480C 56C 3.8GHz, NVIDIA H100, Infiniband NDR400, Nvidia NVIDIA Corporation United States | 485,888 | 121.40 | 188.65 | |
| 10 | Sierra - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States | 1,572,480 | 94.64 | 125.71 | 7,438 |

Porovnávání výkonnosti počítačů – TOP500 - Evropa



Listopad 2023

| Rank | System | Cores | Rmax (PFlop/s) | Rpeak (PFlop/s) | Power (kW) |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|----------------|-----------------|------------|
| 5 | LUMI - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland | 2,752,704 | 379.70 | 531.51 | 7,107 |
| 6 | Leonardo - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, EVIDEN EuroHPC/CINECA Italy | 1,824,768 | 238.70 | 304.47 | 7,404 |

| Rank | System | Cores | Rmax (PFlop/s) | Rpeak (PFlop/s) | Power (kW) |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----------------|-----------------|------------|
| 16 | ISEG - Gigabyte G593-SD0, Xeon Platinum 8468 48C 2.1GHz, NVIDIA H100 SXM5 80 GB, Infiniband NDR400, Nebius AI Nebius Netherlands | 218,880 | 46.54 | 86.79 | 1,320 |
| 17 | Adastra - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Grand Equipement National de Calcul Intensif - Centre Informatique National de l'Enseignement Suprieur (GENCI-CINES) France | 319,072 | 46.10 | 61.61 | 921 |
| 18 | JUWELS Booster Module - Bull Sequana XH2000 , AMD EPYC 7402 24C 2.8GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR InfiniBand/ParTec ParaStation ClusterSuite, EVIDEN Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany | 449,280 | 44.12 | 70.98 | 1,764 |
| 19 | MareNostrum 5 GPP - ThinkSystem SD650 v3, Xeon Platinum 03H-LC 56C 1.7GHz, Infiniband NDR200, Lenovo EuroHPC/BSC Spain | 725,760 | 40.10 | 46.37 | 5,753 |

Zdroj: <https://www.top500.org/lists/top500/list/2023/11/>



- Srovnání více zaměřeno na datovou zátěž a komplexní datové problémy
- Od roku 2011
- Aktualizován 2x ročně
- Benchmark postaven na grafových algoritmech a prohledávání do šířky
 - Breadth-First Search (BFS)
 - Single Source Shortest Paths (SSSP)
- **Hlavní metrika: Gtep/s** (počet hran zpracovaných za sekundu)
- **Green Graph500** (výkonnost vzhledem ke spotřebě)
- <https://graph500.org>

Porovnávání výkonnosti počítačů – Graph500 - BFS



| RANK | MACHINE | VENDOR | INSTALLATION SITE | LOCATION | COUNTRY | YEAR | NUMBER OF NODES | NUMBER OF CORES | SCALE | GTEPS |
|------|-------------------------|---------------------------|------------------------------------------------|--------------|---------------|------|-----------------|-----------------|-------|----------|
| 1 | Supercomputer Fugaku | Fujitsu | RIKEN Center for Computational Science (R-CCS) | Kobe Hyogo | Japan | 2020 | 152064 | 7299072 | 42 | 138867 |
| 2 | Wuhan Supercomputer | HUST | Wuhan Supercomputing Center | Wuhan | China | 2023 | 252 | 6999552 | 41 | 115357.6 |
| 3 | Frontier | HPE | DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory | Oak Ridge TN | United States | 2021 | 9248 | 8730112 | 40 | 29654.6 |
| 4 | Pengcheng Cloudbrain-II | HUST-Pengcheng Lab-HUAWEI | Pengcheng Lab | ShenZhen | China | 2022 | 488 | 93696 | 40 | 28463.1 |
| 5 | Sunway TaihuLight | NRCPC | National Supercomputing Center in Wuxi | Wuxi | China | 2015 | 40768 | 10599680 | 40 | 23755.7 |

Zdroj: https://graph500.org/?page_id=1240

Porovnávání výkonnosti počítačů – Graph500 - SSSP



| RANK | MACHINE | VENDOR | INSTALLATION SITE | LOCATION | COUNTRY | YEAR | NUMBER OF NODES | NUMBER OF CORES | SCALE | GTEPS |
|------|------------------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------------|------------|---------|------|-----------------|-----------------|-------|---------|
| 1 | Wuhan Supercomputer | HUST | Wuhan Supercomputing Center | Wuhan | China | 2023 | 252 | 6999552 | 41 | 15335.9 |
| 2 | Pengcheng Cloudbrain-II | HUST-Pengcheng Lab-HUAWEI | Pengcheng Lab | ShenZhen | China | 2022 | 488 | 93696 | 40 | 11529.7 |
| 3 | Supercomputer Fugaku | Fujitsu | RIKEN Center for Computational Science (R-CCS) | Kobe Hyogo | Japan | 2020 | 82944 | 3981312 | 39 | 2126.45 |
| 4 | Tianhe Exascale Prototype Upgrade System | National University of Defense Technology | National Supercomputer Center in Tianjin | Tianjin | China | 2021 | 2048 | 131072 | 34 | 2054.35 |
| 5 | SuperMUC-NG | Lenovo | Leibniz Rechenzentrum | Garching | Germany | 2018 | 4096 | 196608 | 37 | 1053.93 |

Zdroj: https://graph500.org/?page_id=1242

Porovnávání výkonnosti počítačů – Green500

- **Hodnocení superpočítačů z pohledu jejich efektivnosti s ohledem na spotřebu energie**
- Spotřeba energie velmi důležitá v souvislosti s budoucími počítači s extrémně velkými výkony
- Od roku 2005

| Rank | TOP500 Rank | System | Cores | Rmax (PFlop/s) | Power (kW) | Energy Efficiency (GFlops/watts) |
|------|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----------------|------------|----------------------------------|
| 1 | 293 | Henri - ThinkSystem SR670 V2, Intel Xeon Platinum 8362 32C 2.8GHz, NVIDIA H100 80GB PCIe, Infiniband HDR, Lenovo Flatiron Institute United States | 8,288 | 2.88 | 44 | 65.396 |
| 2 | 44 | Frontier TDS - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States | 120,832 | 19.20 | 309 | 62.684 |
| 3 | 17 | Adastra - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Grand Equipement National de Calcul Intensif - Centre Informatique National de l'Enseignement Suprieur (GENCI-CINES) France | 319,072 | 46.10 | 921 | 58.021 |
| 4 | 25 | Setonix – GPU - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Pawsey Supercomputing Centre, Kensington, Western Australia Australia | 181,248 | 27.16 | 477 | 56.983 |
| 5 | 92 | Dardel GPU - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE KTH - Royal Institute of Technology Sweden | 52,864 | 8.26 | 146 | 56.491 |

Zdroj: <https://www.top500.org/lists/green500/2023/11/>

Organizace zaměřené na HPC a data v Evropě

EuroHPC JU, ETP4HPC, EOSC, BDVA a další

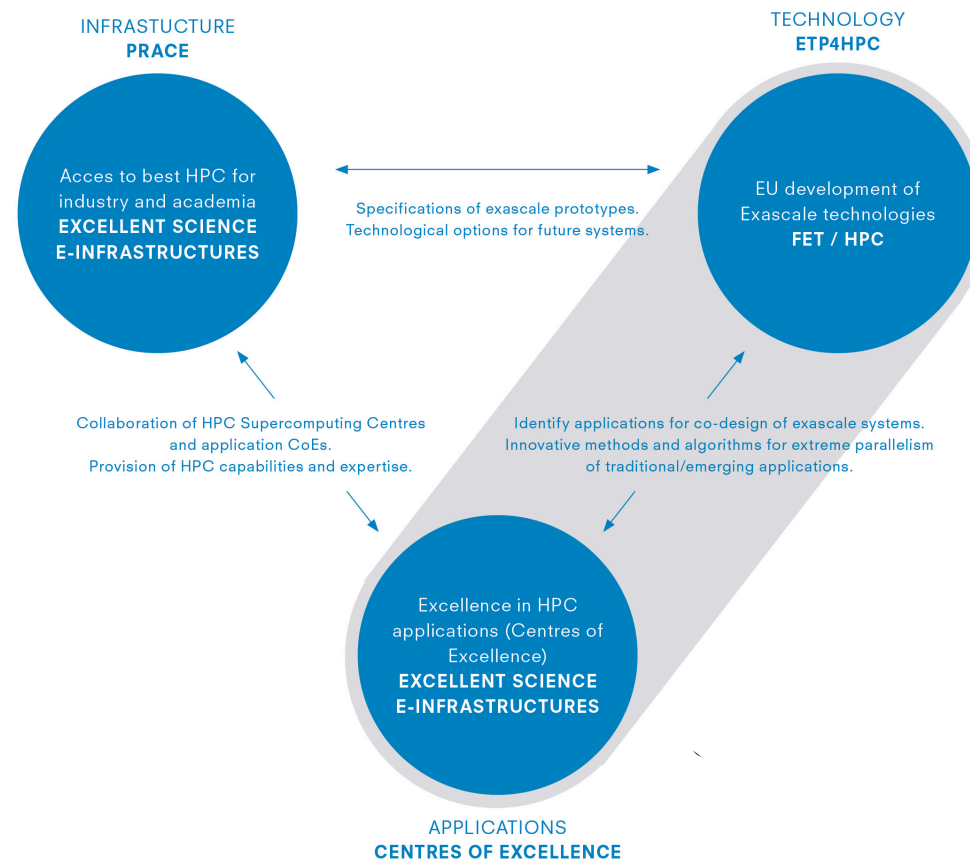
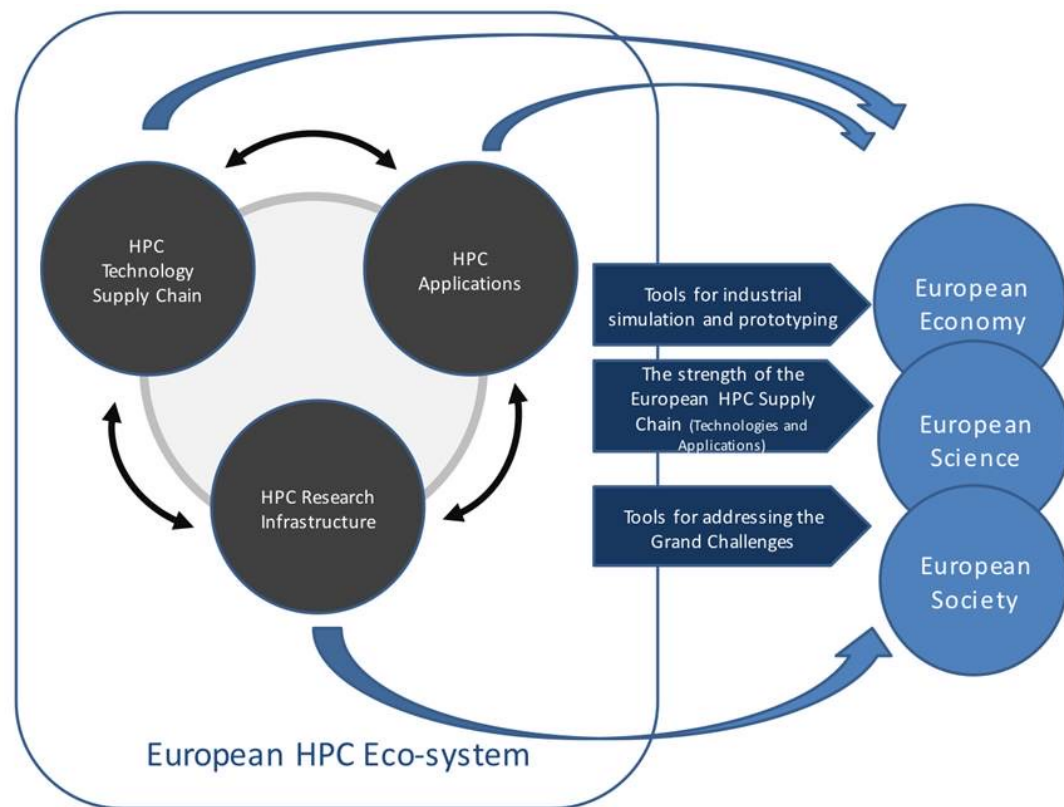
HPC v Evropě

- **Koordinace a podpora konkurenceschopnosti Evropské unie vzhledem ke světovému trhu**
- **Vytvořeny instituce a sdružení za tímto účelem**

Evropský HPC ekosystém byl postaven na 3 základních pilířích:

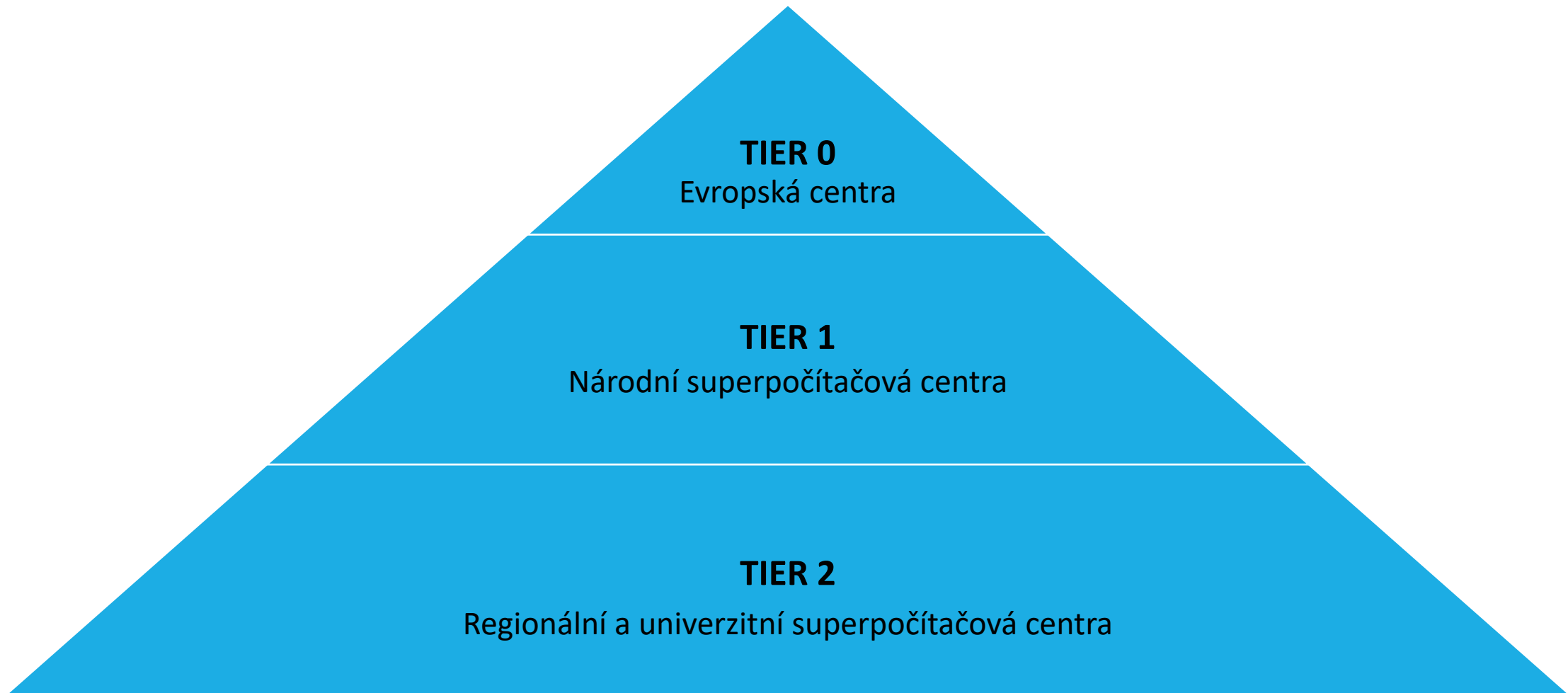
- **Zajištění technologie**
 - Evropská technologická platforma pro HPC ETP4HPC (European Technology Platform for High Performance Computing)
- **Evropská HPC infrastruktura**
 - Dříve reprezentovaná PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), nyní EuroHPC JU
- **Odborné znalosti v oblasti využití HPC**
 - Reprezentované Centry excellence CoE (Centres of Excellence for Computing Applications)

Evropský HPC ekosystém



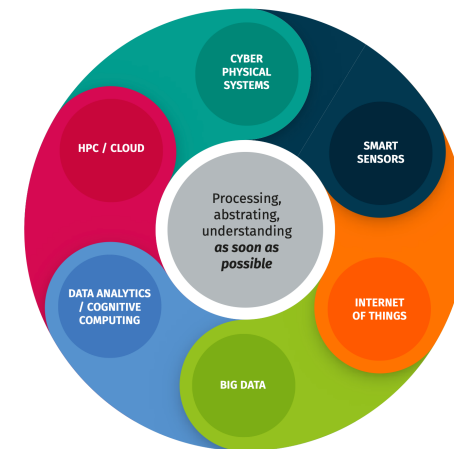
Zdroj: <https://www.etp4hpc.eu/euexascale.html>

Kategorizace superpočítačových center



Výzkumné trendy v oblasti HPC technologií

- **Udržitelnost – zaměření na spotřebu energie**
- **Digital continuum - nový přístup ke zpracování dat a využití výpočetních prostředků**
 - Inteligentní zpracování dat na straně edge (IoT)
 - Transformace dat
 - Spolupráce mezi edge zařízeními a HPC/cloudem
 - Bezpečnost dat, propustnost sítě, využití HPC/cloudu
 - Vytvoření spojitého toku pro komunikaci a zpracování dat
- **HPC pro urgentní rozhodování – rychlé výpočty na základě urgentních požadavků**
- **Propojení HPC, cloudu a ostatní infrastruktury**
- **Heterogenní HPC – různé druhy akcelerátorů, různé typy infrastruktury vhodné pro různé typy úloh**
- **EPI – Vývoj Evropského procesoru**



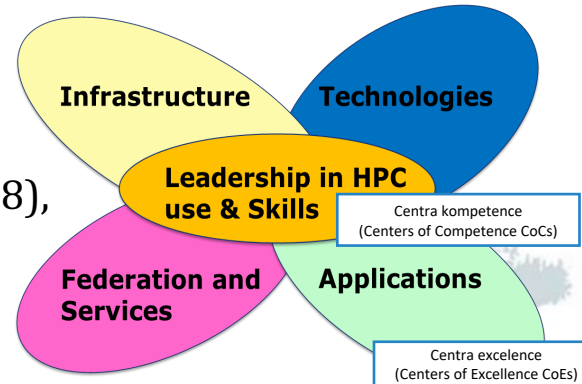
Zdroj: SRA 5 https://www.etp4hpc.eu/pujades/files/ETP4HPC-SRA5_2022_web.pdf

EuroHPC JU (Joint Undertaking)



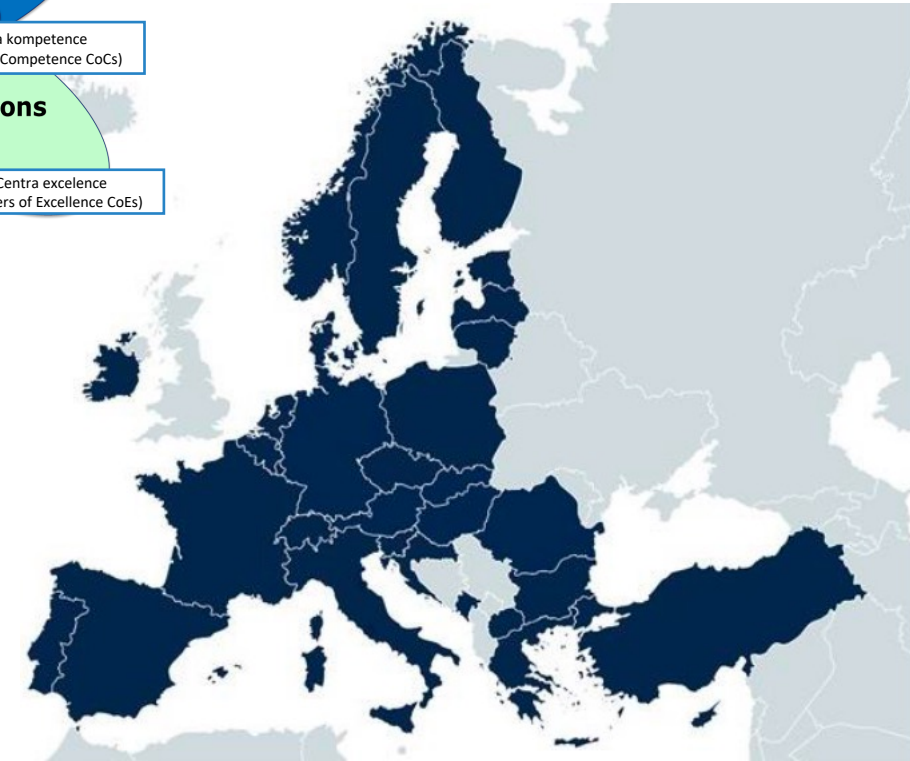
- Evropské sdružení, které mělo v době vzniku cíl v rámci spolupráce evropských zemí podpořit cestu k vybudování vlastního evropského exascalového superpočítače do roku 2022/2023 a tím významně přispět k digitalizaci evropské společnosti a průmyslu

- Sdružení založeno v říjnu 2018, sídlo Luxemburg
- Zapojeno 33 evropských států (ČR členem od ledna 2018), EU a 3 soukromé subjekty (ETP4HPC, BDVA a QuIC)



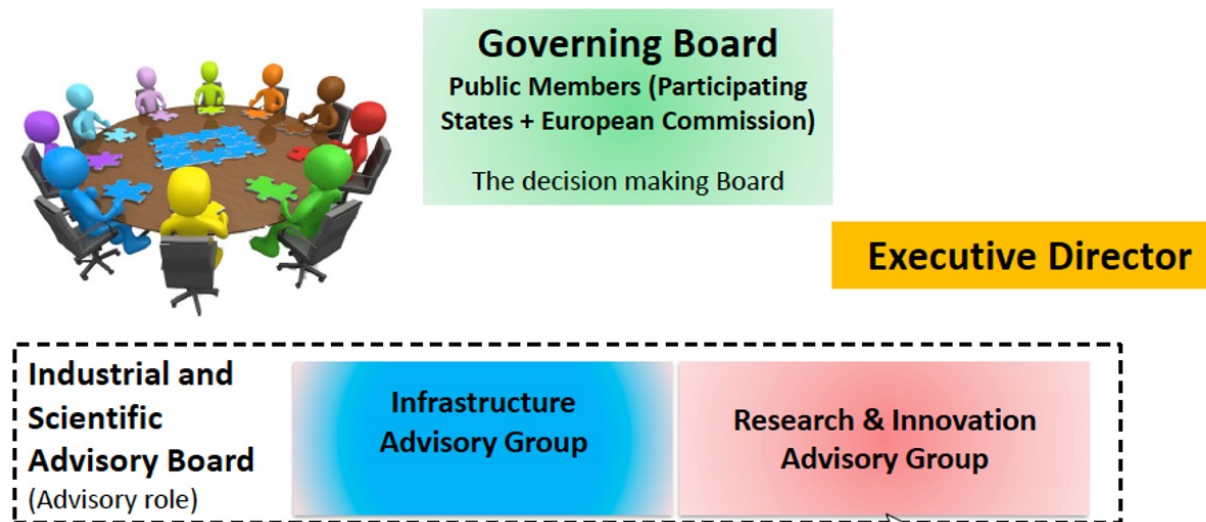
Aktuální cíle

- Vývoj, nasazení a rozšiřování propojeného a bezpečného ekosystému superpočítačů, kvantových počítačů, služeb a datové infrastruktury světové třídy v Evropě.
 - Podpora vývoje a zavádění konkurenceschopného a inovativního superpočítačového systému na základě uživatelských požadavků včetně vývoje aplikací optimalizovaných pro tyto systémy.
 - Rozšíření využití superpočítačové infrastruktury a podpora znalostí a dovedností pro evropskou vědu a průmysl
- <https://eurohpc-ju.europa.eu>



EuroHPC JU – struktura

- **Správní rada (Governing Board)**
 - Členské státy
 - Evropská komise
- **Průmyslová a vědecká poradní rada (Industrial and Scientific Advisory Board)**
 - Poradní výbor pro infrastrukturu (**Infrastructure Advisory Group - INFrag**)
 - Poradní výbor pro výzkum a inovace (**Research and Innovation Advisory Group – RIAG**)





2 exa-scale a 2 mid-range superpočítače (2024-2026)

- Jupiter (Ge)
- Jules Verne (FR)
- Arrhenius (SE)
- Daedalus (GR)

3 pre-exascale superpočítače (2021-2023)

- LUMI - Kajaani (FI)
- Leonardo - Bologna (IT)
- MareNostrum5 - Barcelona (ES)

5 petascale superpočítačů (2020-2021)

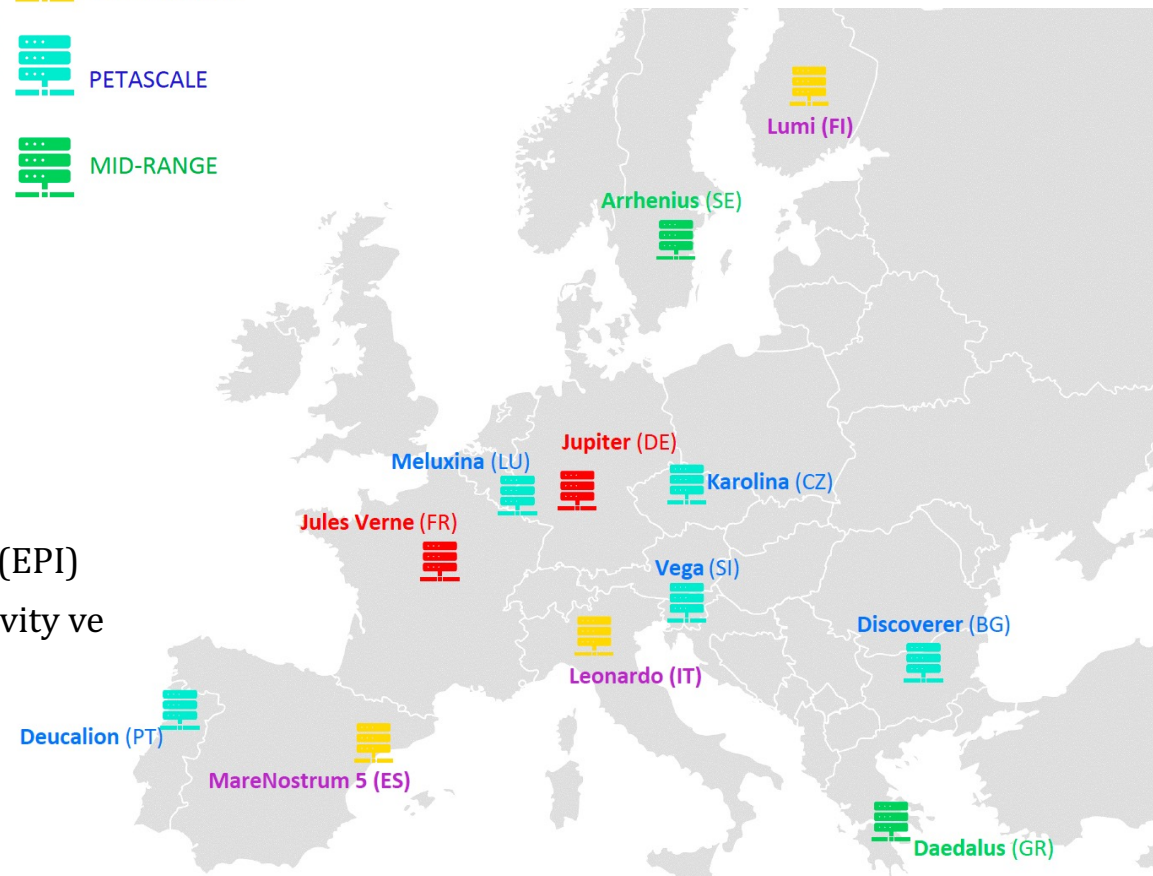
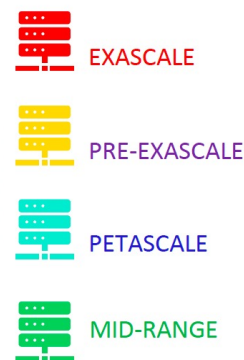
- MeluXina - Bissen (LU)
- Karolina - Ostrava (CZ)
- VEGA - Maribor (SI)
- Deucalion - Guimaraes (PT)
- Discoverer - Sofia (BG)

Podpora HPC ekosystému:

- Vývoj Evropského procesoru pro HPC a exascale pilotního systému (EPI)
- HPC centra kompetence (CoC) propagující inovace a vzdělávací aktivity ve všech participujících státech
- Podpora průmyslu, MSP

Poskytování výpočetního času

- Přes Open Access výzvy



- Evropská technologická platforma pro vysoko-výkonnostní výpočty (European Technology Platform for High-Performance Computing)
- Definování technologických a výzkumných priorit v oblasti vysoko-výkonnostních výpočtů v Evropě
- Založena v roce 2012
- Sdružuje výrobce HPC technologií, výzkumná centra, koncové uživatele (přes 100 členů)
- **Strategická výzkumná agenda SRA (Strategic Research Agenda)**
 - SRA 5 (2022):
 - https://www.etp4hpc.eu/pujades/files/ETP4HPC-SRA5_2022_web.pdf
 - Evropské výzkumné priority pro období 2023 - 2027
 - Podklad Evropské komisi a EuroHPC JU pro definování obsahu programových balíčků zaměřených na HPC a HPDA technologie (výzvy v rámci Horizon Europe, Digital Europe, atd.)



BDVA (Big Data Value Association) DAIRO (Data, AI and Robotics aisbl)



Mezinárodní nezisková organizace výzkumná a inovační organizace s posláním vyvinout inovační ekosystém, který umožní digitální transformaci ekonomiky a společnosti v Evropě založenou na datech a s podporou umělé inteligence.

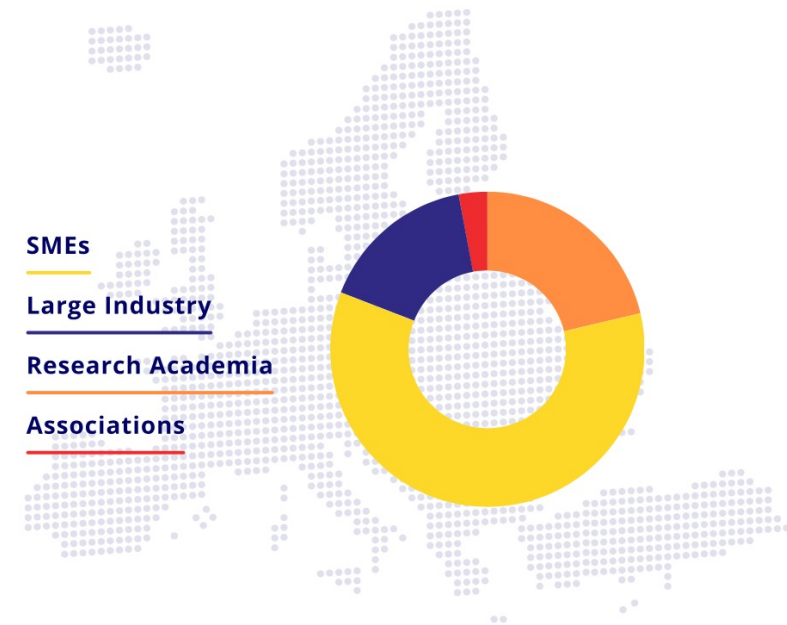
- Technologie a služby zaměřené na velké objemy dat, datové platformy a datové prostory, umělou inteligence
- Standardizace a vzdělávání
- Podpora výzkumu a inovací týkajících se oblasti velkých dat (Big Data)
- Podpora konkurenceschopnosti Evropy v oblasti Big Data technologií
- Více než 240 členů z celé Evropy
- Soukromá (průmysl, MaSP), veřejná, akademická sféra

- **2021 – DAIRO** - snaha o propojení dat, umělé inteligence a robotiky
- **i-Spaces** – digitální ekosystémy
- **2022 - etami** – snaha o etickou, důvěryhodnou, umělou inteligenci v souladu s legislativou

- Neziskové sdružení založené několika významnými podnikateli – velkými podniky, malými a středními podniky, investory a předními výzkumníky – z celé Evropy
- Posílení konkurenceschopnosti a hospodářského růstu evropského průmyslu kvantových technologií a posílení tvorby hodnot na Evropském kontinentu
- 181 členů (únor 2024)

Aktivity:

- Návrh a koordinace strategických cílů a plánů pro evropské kvantové technologie
- Spolupráce s Evropskými institucemi
- Standardizace
- Vzdělávání



EOSC (European Open Science Cloud)



**EUROPEAN OPEN
SCIENCE CLOUD**

- Prostředí pro hostování a zpracování výzkumných dat s cílem podpořit vědu v Evropské unii
- Cílová skupina: Evropští výzkumníci, firmy, občané
- Federativní prostředí pro publikování, vyhledávání a znovu použití dat, nástrojů a služeb pro výzkum, inovace a vzdělávání
 - **FAIR** (Findability, Accessibility, Interoperability and Reusability) **přístup k datům**
 - Findability – dohledatelnost
 - Accessibility – dostupnost, přístupnost
 - Ineroperability – vzájemná propojitelnost, standardizace
 - Reusability – opětovná využitelnost
- Možnost opětovného využití výzkumných dat a všech ostatních digitálních objektů vytvořených během výzkumného životního cyklu (např. metody, software, publikace)
- Implementace ve členských státech EU
- EOSC-CZ: <https://www.eosc.cz>









- Iniciativa, která vyvíjí softwarový framework pro správu, řízení a implementaci společných pravidel, která mohou být aplikována na jakékoliv existující cloud/edge technologie
- Výstupem by měl být federovaný systém spojující mnoho poskytovatelů cloudových služeb a uživatelů dohromady v transparentním prostředí (Federovaná bezpečná infrastruktura)
- Kontrola uživatelů nad vlastními daty (zachování suverenity)
- **Cíl** – vytvořit ekosystém, kde jsou data sdílena a zpřístupňována v důvěryhodném prostředí
 - Transparentnost
 - Regulovatelnost
 - Přenositelnost
 - Interoperabilita (propojitelnost)
- **Gaia-X HUBs**
 - Huby jsou národními a centrálními kontaktními místy a základními podporovateli Gaia-X v každé zemi
 - Nejen Evropa, ale i USA, Japonsko a Jižní Korea



Centra Excellence (Centres of Excellence CoEs)



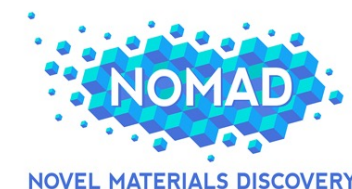
- Cílem je podpořit přední postavení Evropy v oblasti HPC aplikací a pokrýt důležité oblasti jako obnovitelné zdroje energie, materiály, modely a návrh
- Podpora HPC kódu, výpočetních aplikací, extrémně náročného počítání a dat (exascale a více)

- **Koordinace:**    
 - **BioExcel** - Centre of Excellence for Biomolecular Research
 - **ChEESE** - Centre of Excellence in the domain of Solid earth
 - **CoEC** - Centre of Excellence in Combustion
 - **CompBioMed** - Centre of Excellence in Computational Biomedicine
 - **E-CAM** - European infrastructure for computational science applied to simulation and modelling of materials and of biological processes
 - **EoCoE** - Energy oriented Centre of Excellence for computer applications
- 
- 
- 
- 

Centra Excellence (Centres of Excellence CoEs)



- **ESiWACE** - Excellence in Simulation of Weather and Climate in Europe
- **EXCELLERAT** - Centre of Excellence for Engineering Applications
- **HiDALGO** - HPC and Big Data Technologies for Global Systems
- **MaX** - Materials design at the eXascale
- **NOMAD** - Novel Materials Discovery Center Of Excellence
- **PerMedCoE** - Centre of Excellence in Personalised Medicine
- **POP** - Performance Optimisation and Productivity Centre of Excellence
- **RAISE** - Research on AI- and Simulation-Based Engineering at Exascale
- **TREX** - Targeting Real Chemical Accuracy At The Exascale



Národní Centra Kompetence (National Centres of Competence CCs)



- Koordinace: **EuroCC projekt** - provázání dosavadních národních center do jednoho integrovaného systému
- Spolupráce s aplikační sférou, vytváření poznatků s vysokým potenciálem pro přímé uplatnění v praxi
- Průmyslově orientovaná architektura, podpora softwarového prostředí a služeb
- Zpřístupnění HPC infrastruktury
- Podpora průmyslu, malých a středních podniků
- Vzdělávání, kurzy

Digitální Inovační HUBy (DIH)

- Jednotná kontaktní místa (one-stop-shops), která usnadňují firmám digitalizovat jejich podnikání
- Pomáhají firmám v růstu jejich konkurenceschopnosti formou zlepšování jejich business/výrobních procesů, produktů i služeb prostřednictvím digitálních technologií
- Nabízejí přístup ke znalostem a technologiím, které nejsou firmám běžně dostupné
- Poskytují nezávislé expertízy
- Umožňují experimentovat a nalézat nová řešení
- Regionální spojení více partnerů s přesahem mimo region
- Klienti: MSP, velké firmy, organizace veřejné správy, zdravotnická zařízení, start-upy apod.
- Katalog DIHů: <https://european-digital-innovation-hubs.ec.europa.eu/edih-catalogue>

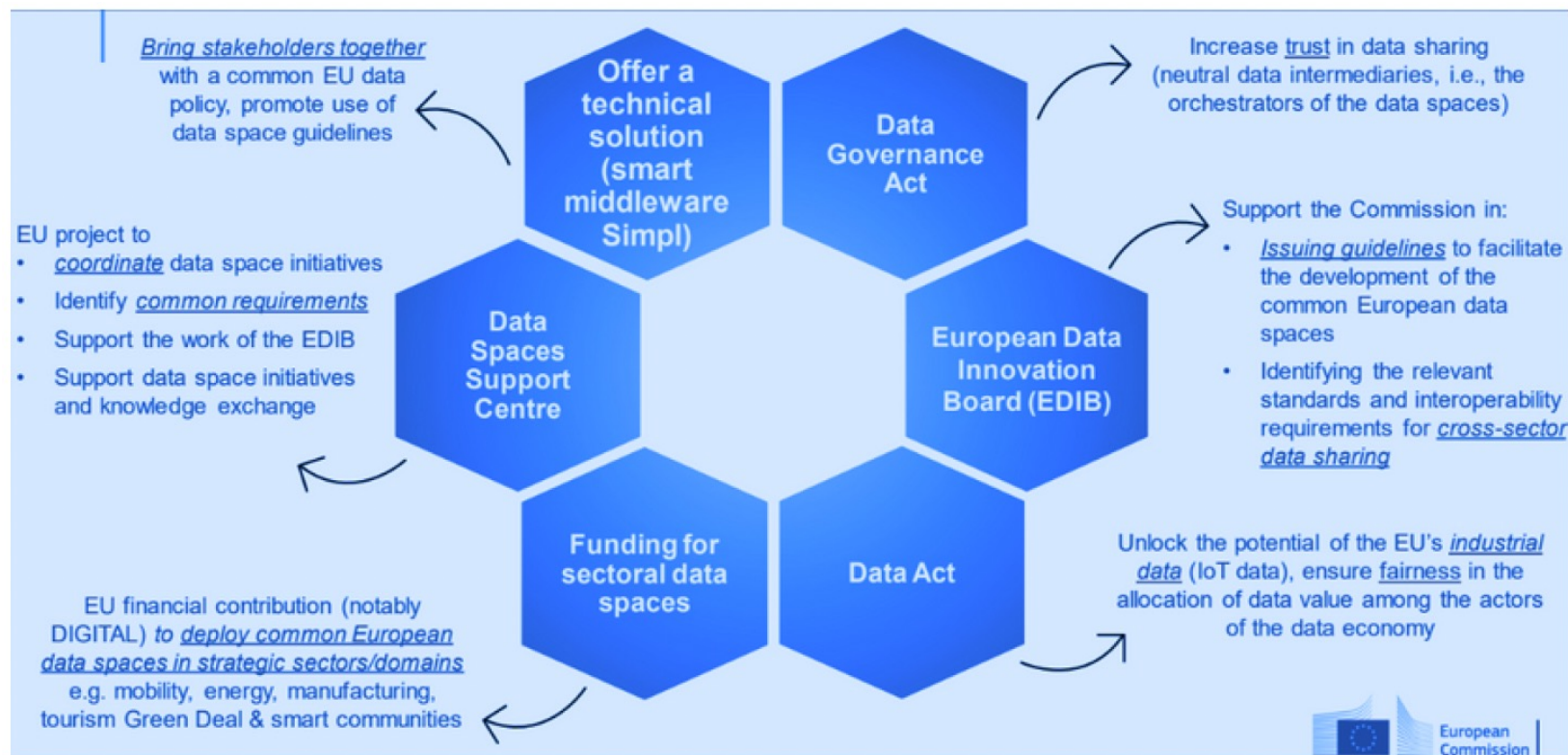


Evropská datová strategie – datové prostory

Cílem evropské datové strategie je učinit z EU lídra a vzorovou společnost založenou na datech.

Vytvoření jednotného trhu s daty umožní jejich volný tok v rámci EU a napříč odvětvími ve prospěch podniků, výzkumných pracovníků i orgánů veřejné správy.

- Jedna z priorit EU
- Vytvoření interoperabilních **datových prostorů** v celé EU ve strategických odvětvích (**data spaces**)



Trendy využití HPC v Evropě a ve světě

Trendy využití HPC I

Problémy zaměřené na Big data, analýzu dat, umělou inteligenci, modelování a HPC v cloudu.

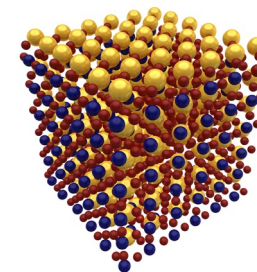
Některé typické oblasti:

- **Matematické modelování**

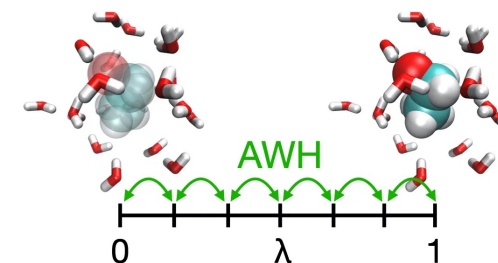
- Využití ve všech oblastech vědy a při vývoji nových technologií
- Numerická řešení matematických modelů vyžadují znalosti různých vědeckých disciplín
- Např. analýza nekonečně dimenzionálních systémů rovnic a jejich diskretizace, řešení konečně dimenzionálních úloh

- **Molekulární dynamika**

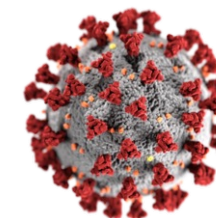
- Analýza dynamiky rozsáhlých makromolekul včetně biologických systémů jako proteiny, nukleové kyseliny (DNA, RNA) a membrány
- Výpočetní výkon často používán k simulacím, predikci či analýze interakcí atomů v systému
- Studium biologických systémů, zpracování/porovnávání genomů a DNA/RNA sekvencí např. pro hledání léčiv, dokování proteinů
- V materiálovém inženýrství a nanotechnologii využití např. pro predikci defektů, lomů, vývoj nových technologií, modelování chemických reakcí atd.



Zdroj: MaX



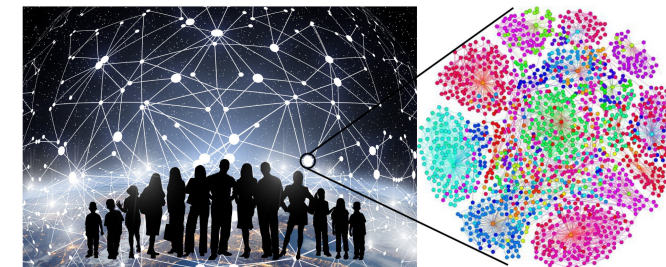
Zdroj: BioExcel



Trendy využití HPC II

- **Analýza grafů a řešení grafových problémů**

- Obecně metody využívající grafové úlohy, zpracování/analýza rozsáhlých grafů
- Často superpočítače se speciálním HW pro tento typ úloh
- Např. grafy sociálních sítí, proteinových interakcí v živém organismu, dopravní sítě atd.



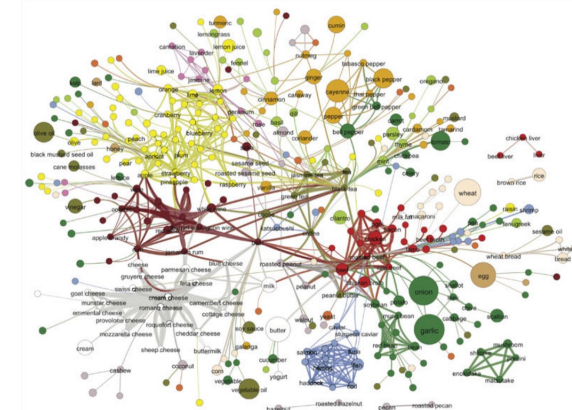
Zdroj: HiDALGO

- **Simulace**

- Obecně metody využívající náhodnost a statistické vzorkování pro vyřešení problémů
- U výsledků se sice pracuje s určitou mírou nejistoty, ale „síla velkých čísel“ umožňuje nejistotu snížit se zvyšujícím se počtem vzorků
- Např. analýza radioaktivního rozpadu, Brownova pohybu, nebo všude tam, kde lze předpokládat nejistotu v datech (simulace povodní, geoprostorové analýzy, CFD aerodynamické modelování, modelování dopravního toku, vývoje počasí a klimatických změn, cen akcií na trhu apod.)

- **Velké jazykové modely**

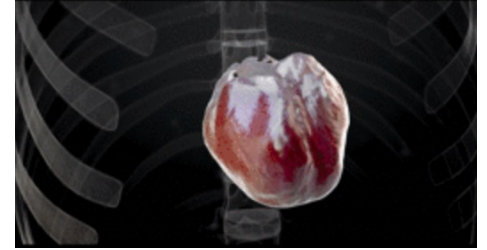
- Large language models (LLM), tvůrčí (generativní) umělá inteligence
- Zpracování indexů, využití umělé inteligence pro vyhledávání
- Vytváření multimédií



Trendy využití HPC III

- **Zpracování grafiky a multimédií**

- Např. 3D vizualizace a renderování obrazu
- Kódování/dekódování obrazu, zpracování obrazu a jeho analýza, počítačově generovaná grafika
- Využití v různých oblastech jako zdravotnictví, bezpečnost, doprava, zpracování radarových snímků, vizualizace a modelování v průmyslu, astrologie, nebo i filmový a herní průmysl



Zdroj: CompBioMed

- **Vysoce výkonné datové analýzy obecně (HPDA)**

- Analýza a zpracování velkých dat (Big Data)
- Prolíná se s výše uvedenými oblastmi (např. finanční analýzy, datové analýzy různého typu, analýzy spojené s grafovými úlohami)
- Často využívány metody umělé inteligence (AI, Artificial intelligence) a zejména pak intenzivně se rozvíjející oblast strojového učení (machine learning)
- Identifikace správného nastavení vstupních parametrů (hyperparameter search) apod.



Trendy využití HPC IV

- **Digitální dvojčata (digital twins)**

- Vytvoření digitální reprezentace fyzického objektu nebo systému (replika ve virtuálním světě pomocí odpovídajících matematických modelů)
- Digitální dvojče získává vstupní data ze sensorů svého dvojčete z reálného světa
- **Cíl:**
 - Simulace objektu v reálném čase, identifikace potenciálních problémů, optimalizace výkonu
 - Také zpětná vazba při návrhu produktu (v případě prototypů)
- **Typické příklady:**
 - Výroba – simulace procesů v továrnách (výrobní linky)
 - Automobilový průmysl – autonomní vozidla, návrh nových materiálů, konstrukční problémy
 - Zdravotnictví – simulace orgánů člověka, predikce zdravotního stavu pacienta
 - Klimatologie a počasí - modely počasí, predikce, digitální model země (Destination Earth)
 - Urbanistická oblast – budovy, celá města (Smart Cities)

- **Kvantové počítače**

- Podpora vývoje kvantových počítačů (HW)
- Vývoj kvantových simulátorů



Zdroj: Digipredict



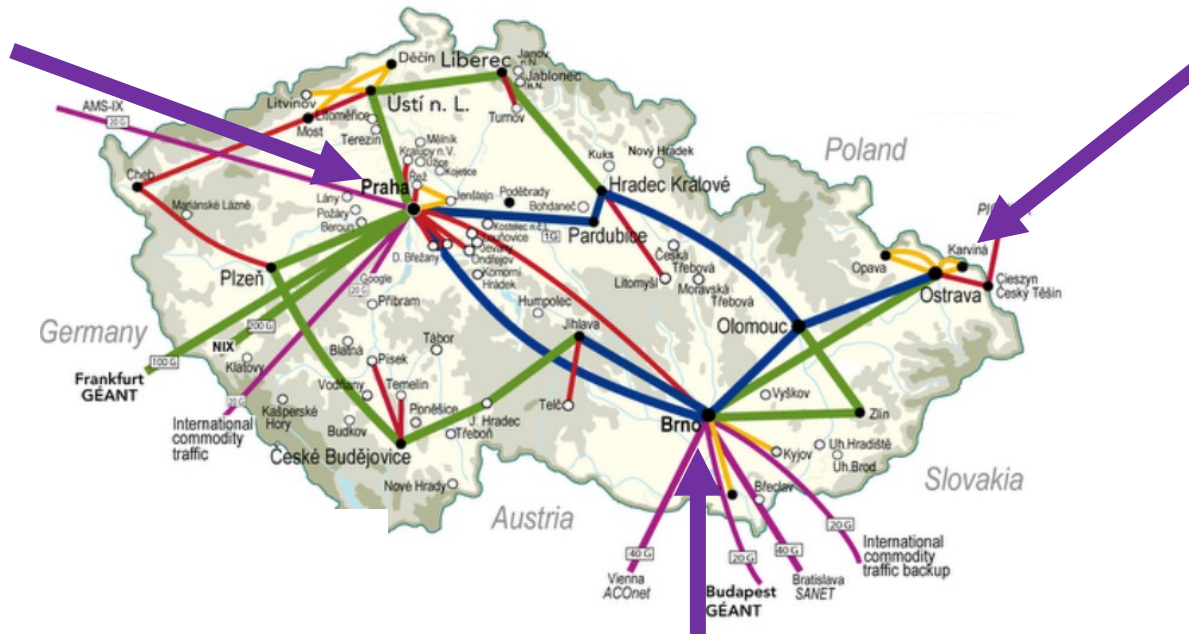
Zdroj: Destination Earth

HPC v České republice

Velké výzkumné infrastruktury, Národní superpočítačové centrum

- Velké národní infrastruktury pro výzkum, experimentální vývoj a inovace podporované Ministerstvem mládeže a tělovýchovy
- Poskytování vysoce kvalitních a dostatečně dimenzovaných ICT služeb pro výzkumnou komunitu

cesnet



VSB TECHNICAL UNIVERSITY OF OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NATIONAL SUPERCOMPUTING CENTER

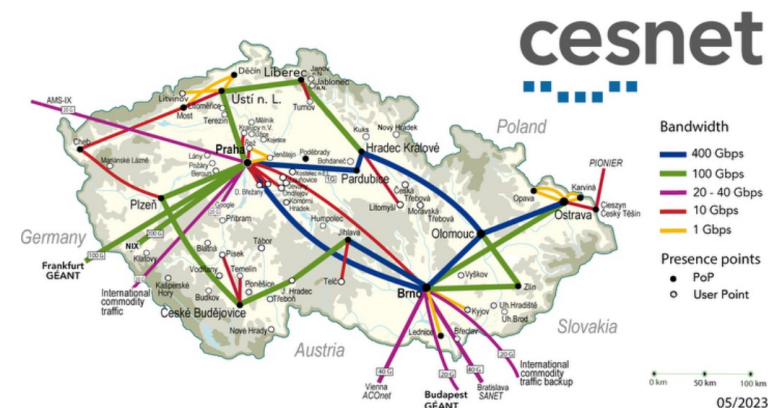


cerit
scientific cloud

<https://www.e-infra.cz/o-nas/clenove>

- e-infrastruktura pro výzkum a vývoj ČR, která představuje transparentní prostředí pro přenos, ukládání a zpracování vědeckých dat pro subjekty zabývající se výzkumem a vývojem
- Poskytuje vysoce propustnou národní komunikační síť, národní gridovou infrastrukturu, infrastrukturu velkokapacitních úložišť a prostředí pro spolupráci distribuovaných výzkumných týmů
- Sdružení vysokých škol a Akademie věd ČR
- Národní akademická federace identit **eduID.cz**
- **Národní síť pro výzkum a vzdělávání** (National Research and Education Network NREN)
- **Národní gridová infrastruktura** (National Grid Infrastructure NGI)
- Součástí panevropské páteřní sítě pro výzkum a vzdělávání **GÉANT** a panevropské gridové infrastruktury **EGI** (sdružuje datová centra a poskytovatele cloudu napříč Evropou a ve světě)

Topologie sítě



Zdroj: <https://www.cesnet.cz>

CERIT-SC (Scientific Cloud)

- **Centrum výzkumu, vzdělávání a inovací CERIT Scientific Cloud**
- Centrum je součástí kapacit Ústavu výpočetní techniky Masarykovy univerzity v Brně
- Národní centrum poskytující distribuované výpočetní kapacity a související služby, datová úložiště
- **Uzel Národní gridové infrastruktury MetaCentrum (NGI)**
 - Virtuální prostředí umožňující využití dostupných výpočetních zdrojů pro řešení náročnějších výpočetních úloh, jejichž řešení není možné v rámci samostatného pracoviště
 - K dispozici akademickým a výzkumným institucím pro spolupráci v oblasti výpočtů a ukládání dat
 - Napojení na Evropské Gridové Infrastruktury (EGI)
- Služby poskytovány v rámci e-Infra prostřednictvím CESNET



Zdroj: <https://www.cerit-sc.cz>
<https://www.metacentrum.cz/cs/>

IT4Innovations

Národní superpočítačové centrum

VŠB – Technická univerzita v Ostravě

- **Národní superpočítačové centrum**
- **Provoz nejvýkonnějších superpočítačových technologií v České republice**
- **Provozuje několik superpočítačů**
 - Anselm, Salomon (vyřazeny)
 - Barbora
 - DGX-2
 - Karolina (2021)
 - LUMI (2022)
- **Výzkumné a vývojové centrum se silnými mezinárodními vazbami**
 - Zapojení v řadě mezinárodních projektů
- **Výzkumné laboratoře**
 - Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
 - Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
 - Laboratoř modelování pro nanotechnologie
 - Laboratoř pro big data analýzy
 - Laboratoř pro výzkum infrastruktury
- <https://www.it4i.cz>



Zapojení v mezinárodních organizacích

- Od roku 2011 členem celoevropské výzkumné infrastruktury **PRACE**
- Od roku 2016 zapojeno v **ETP4HPC** (European Technology Platform for High-Performance Computing)
- Od roku 2018 participuje na přípravě evropského sdružení **EuroHPC JU** (zapojení ČR od 2019)
- V současnosti **Digitální Inovační Hub** (DIH) evidovaný evropskou komisí na podporu inovací v oblasti HPC, numerických simulací a pokročilých datových analýz primárně v malých a středních podnicích
- **Centrum kompetence pro HPC** v České Republice
- Od roku 2018 členem **ICT Innovation for Manufacturing SMEs**
- Od roku 2019 člen **BDVA/DAIRO**
- Od roku 2019 člen **EUDAT, EOSC**
- Od roku 2020 člen **HiPEAC**



EuroHPC
Joint Undertaking



BDV BIG DATA VALUE ASSOCIATION



EUDAT



IT4Innovations - Infrastruktura



2013 – Anselm

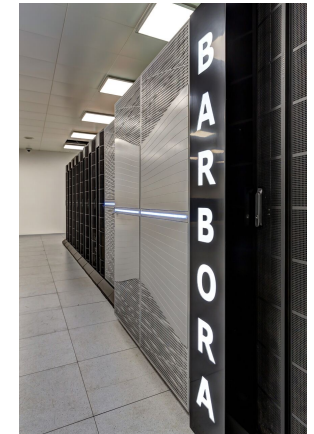


2019 – Nvidia DGX-2

2014 - budova



2019 – Barbora



2015 - Salomon



2021 – Karolina

V současnosti již mimo provoz – od roku 2021 umístěn v technickém muzeu – Dolní oblast Vítkovic v Ostravě

- **209 compute nodes**
- **3 344 Intel Sandy bridge cores**
- **15 136 GB RAM (64, 96, 512)**
- **24 nVidia Tesla K20**
- **4 Intel Xeon Phi (240 cores)**

- **Rpeak 94TFlop/s**
- **Rmax 73TFlop/s (LINPACK)**

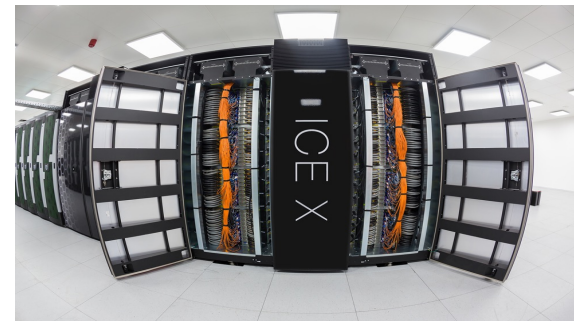
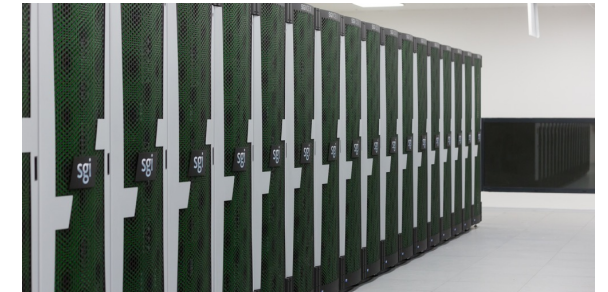


IT4Innovations - Salomon

V současnosti již mimo provoz

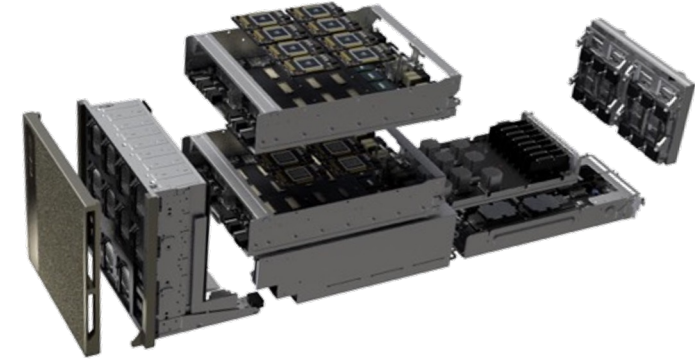
- **1 008 compute nodes**
- **24 192 Intel Haswell cores**
- **129 024 GB RAM (128)**
- **864 Intel Xeon Phi 7120P (52 704 cores)**

- **Rpeak 2PFlop/s**
- **Rmax 1.5Flop/s (LINPACK)**

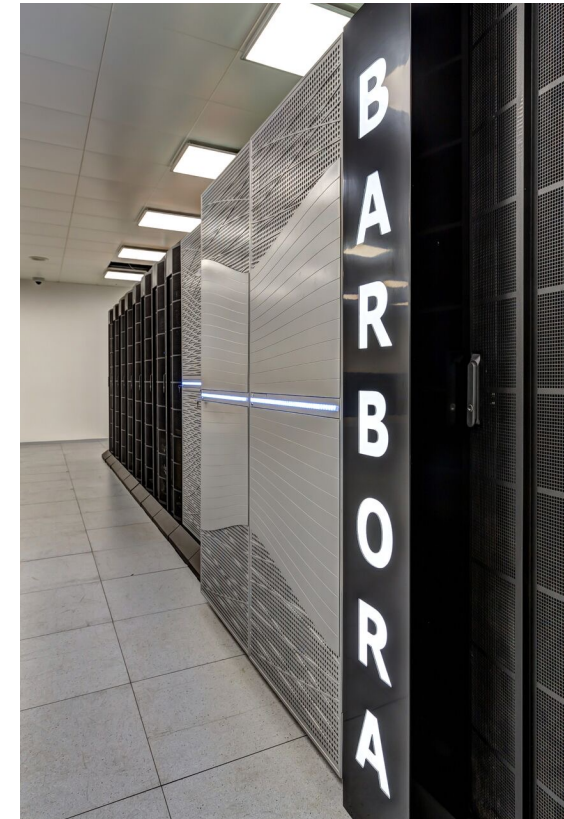


IT4Innovations – NVidia DGX-2

- **Pro výpočty umělé intelligence**
- **Rpeak až 130 TFlop/s**
- **Akcelerátory pro datová centra 16 x NVIDIA Tesla V100 GPU**
 - 16x2560 FP64 cores
 - 16x5120 FP32 cores
 - 16x640 tensor cores
 - 1.5 TB RAM, 512GB HBM
- **2x24 x86_64 Xeon Platinum jader, celkem 48**
 - instruction set AVX-512
- **NVLINK network interconnecting GPGPU**
 - 12x NVSwitch, propustnost 2.4TB/s in bisection
- **Připojení do okolní infrastruktury 8x100Gb/s Infiniband/Ethernet**
- **NVMe SSD storage 30TB**



- **Rpeak: 849 Tflop/s**
- **Atos Bull Sequana**
- **192 výpočetních uzlů, 2x18 jádrový Cascade Lake 6240**
 - AVX-512 instruction set, 192GB RAM
- **8x GPU nodes, 2x12 cores, 192GB RAM**
 - 4x Nvidia Tesla V100 per node, 16GB HBM2, 192 RAM
- **1x tlustý uzel, 8x16 jádrový Intel Skylake, 6TB RAM**
- **Infiniband HDR, 200Gb/s link speed, 4 islands, fat tree topology**
- **Burst buffer accelerated SCRATCH 310TB, 28GB/s**
- **Small HOME, 25TB**
- **22.4TB NVMe over Fabric**
 - accessible remotely on all nodes
- **PBS-Pro scheduler**



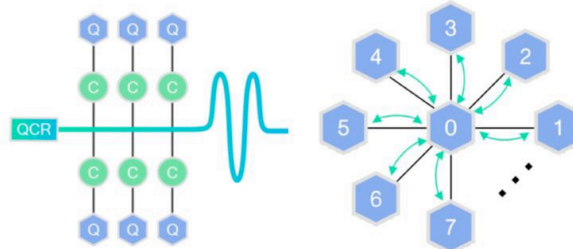
Jeden z 5 petascale systémů podporovaných EuroHPC JU

- **R_{peak}: 15,2PFlop/s**
- **R_{Max}: 9,1PFlop/s (LINPACK)**
- **R_{AI}: 350PFlop/s (DeepLearning)**
- **Univerzální část: 2,3PFlop/s (LINPACK) (720 serverů)**
- **Akcelerovaná část:**
 - 11,6 PFlop/s (LINPACK) (72 serverů, 8GPU každý)
 - 360 PFlop/s (DeepLearning)
- **Část pro datové analýzy: 24 TB sdílené paměti**
- **Cloud partitition: 192 TFlop/s (LINPACK) (36 serverů)**
- **Vysokorychlostní síť: až 200 Gb/s**
- **Datové úložiště: více než 1,4 PB pro vysokorychlostní zpracování uživatelských dat rychlostí až 1 TB/s**

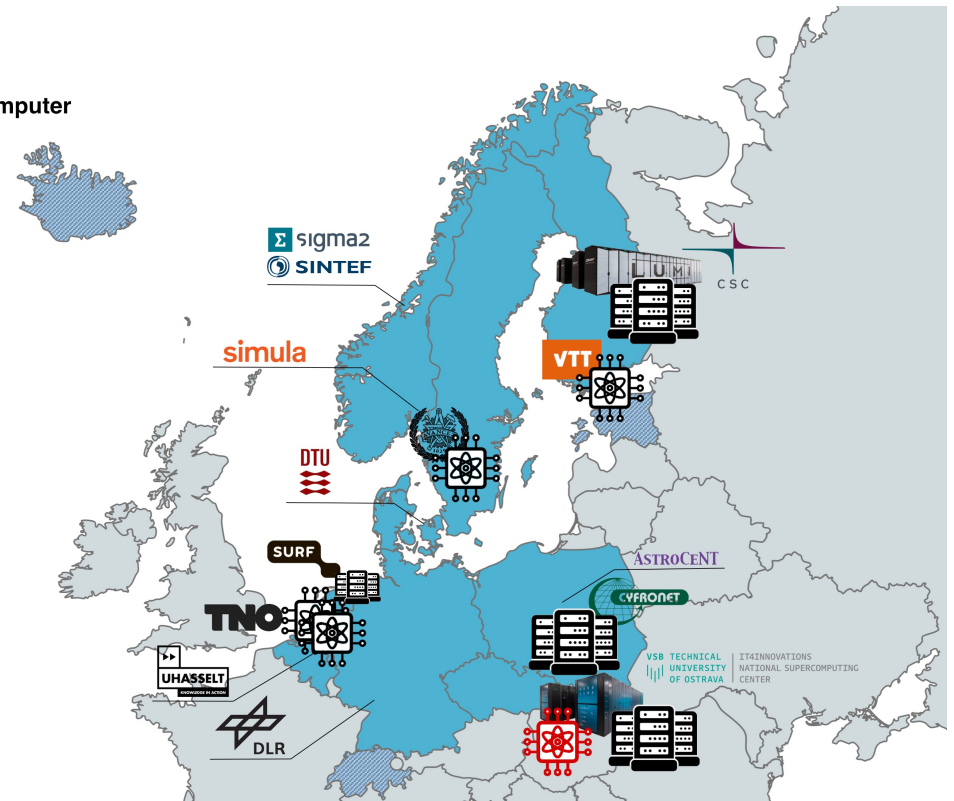


IT4Innovations - LUMIQ

- **Evropský kvantový počítač** (budování od roku 2023)
- **Integrace se superpočítačem Karolina**
- LUMIQ consortium (9 evropských zemí) + Německo a Nizozemí
- Přístup ke kvantovému počítači nejen pro domácí uživatele, ale i pro partnery
- Plánování úloh pro spuštění
- Účtování nákladů za spotřebované zdroje
- 20 qubitů
- Propojení one-to-all
- Hvězdicová topologie



- LUMI-Q consortium
- LUMI consortium
- LUMI-Q quantum computer
- quantum computer
- supercomputer

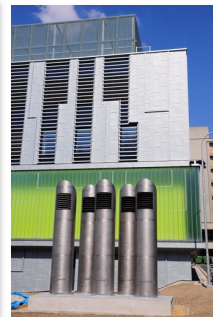




Chlazení teplou a studenou vodou, rekuperační systém



Záložní zdroje energie UPS 2x2,5MVA



OxyReduct – protipožární opatření

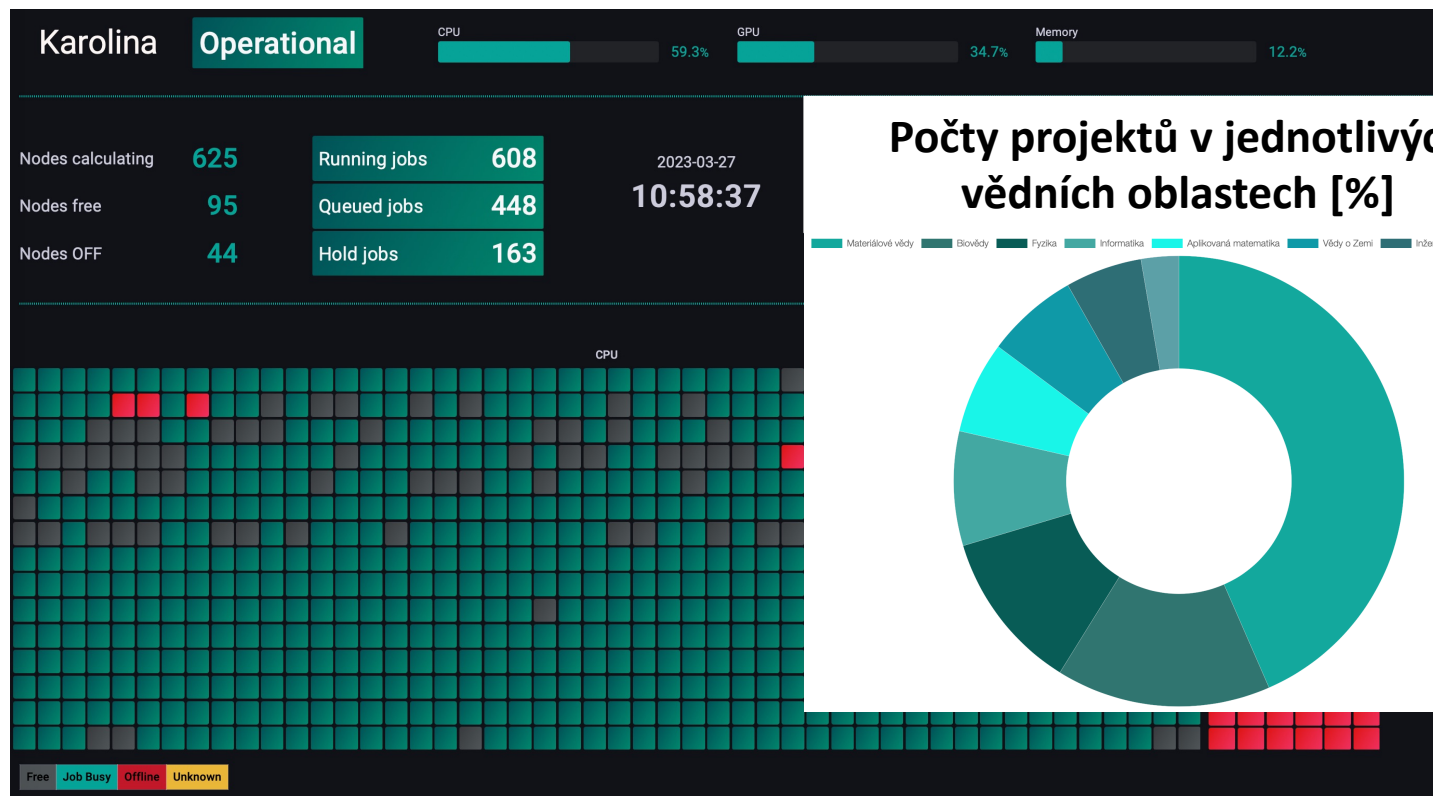


- **Open access výzvy pro poskytování výpočetního času (EuroHPC, LUMI)**
 - Projektové výzvy 3x ročně (únor, červen, říjen) pro výzkumníky a zaměstnance vědeckých a vzdělávacích institucí
 - Podléhá recenznímu řízení
- **Ředitelská fronta (Director's discretion)**
 - Možno požádat kdykoliv. Výpočetní čas je přiřazován nepravidelně vzhledem k volným kapacitám IT4Innovations
 - Např. Výjimečné projekty, komerční výzkum
- **Vzdělávací a školící aktivity**
 - Každoročně více než 10 akcí ročně
 - PRACE letní/zimní školy
 - Školící centrum PRACE, NVIDIA
- **Podpora uživatelům výpočetní infrastruktury**

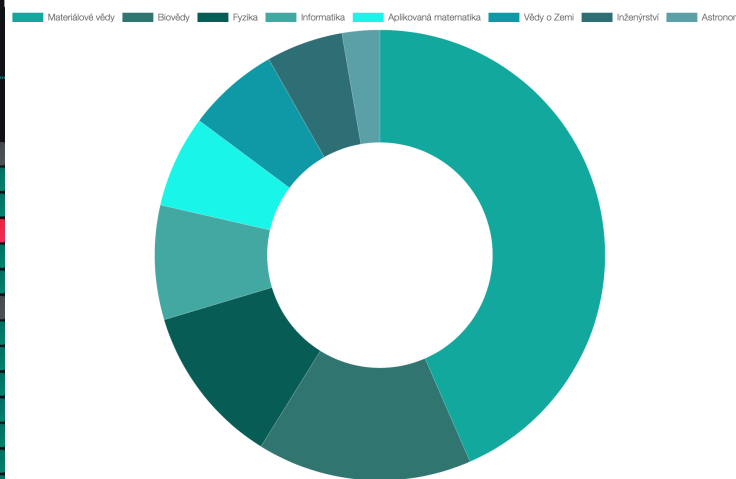
IT4Innovations – Využití infrastruktury

Aktuální stav vytížení výpočetní infrastruktury:

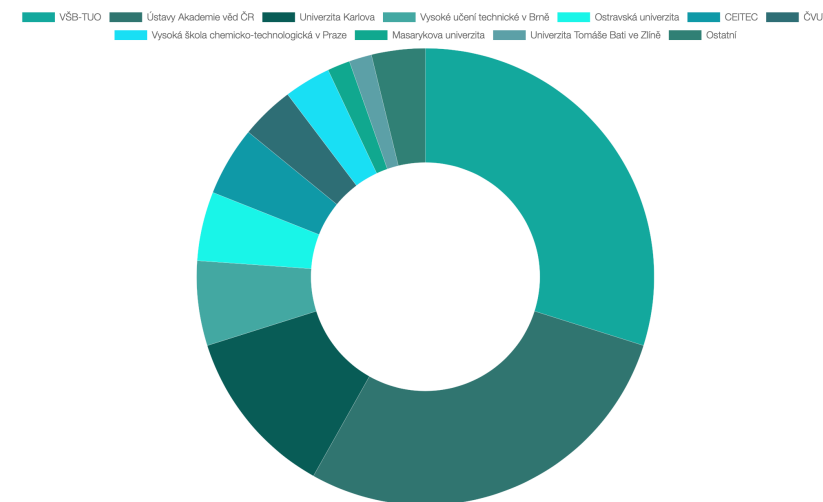
- [Barbora](#)
- [Karolina](#)



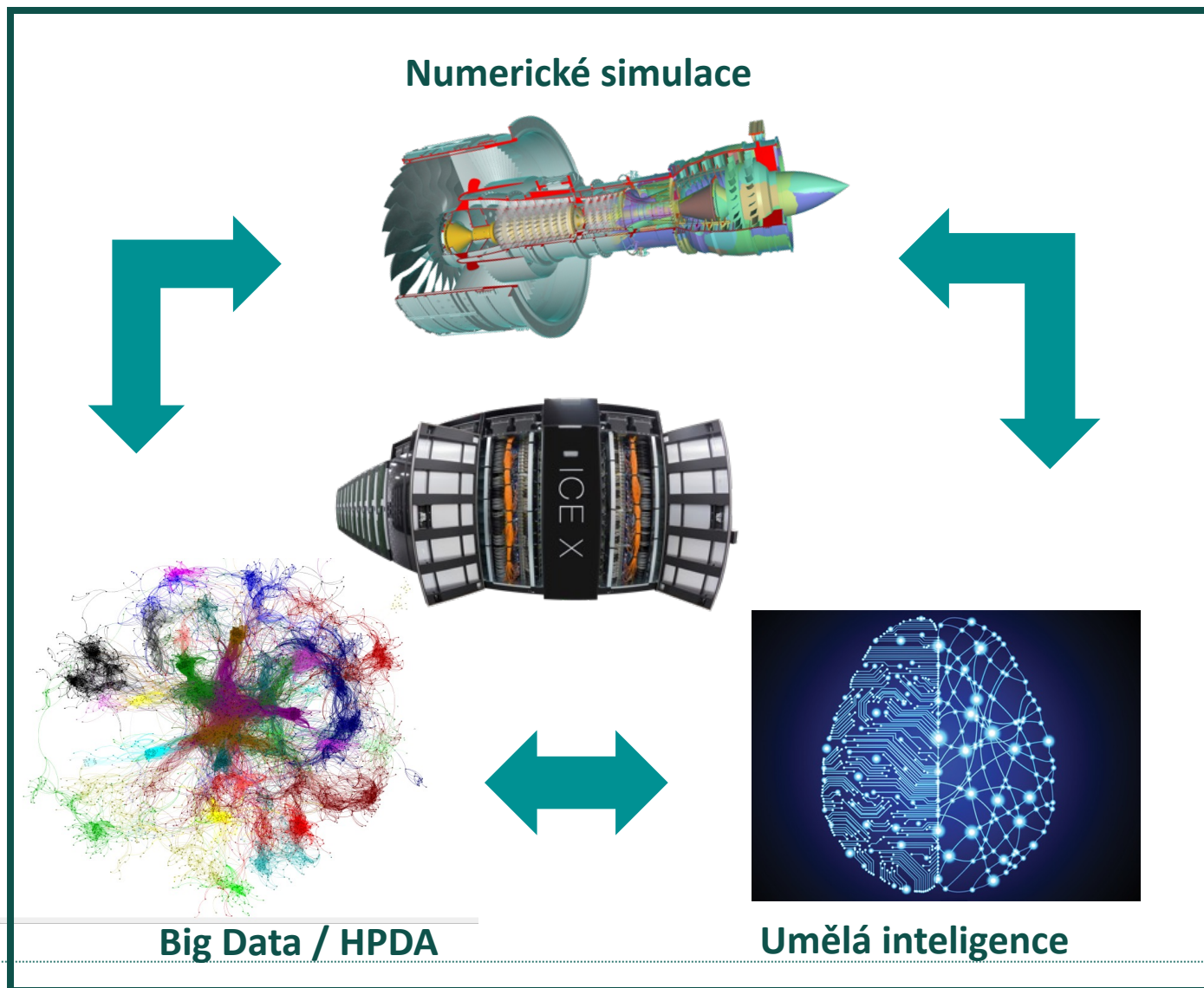
Počty projektů v jednotlivých vědních oblastech [%]



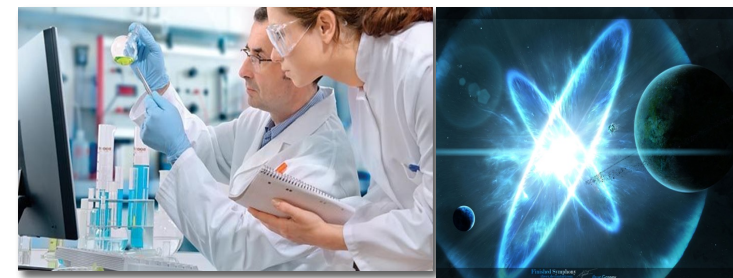
Využití superpočítače jednotlivými institucemi v [%]



IT4Innovations – Výzkumné aktivity



Výzkum & vývoj



Společnost



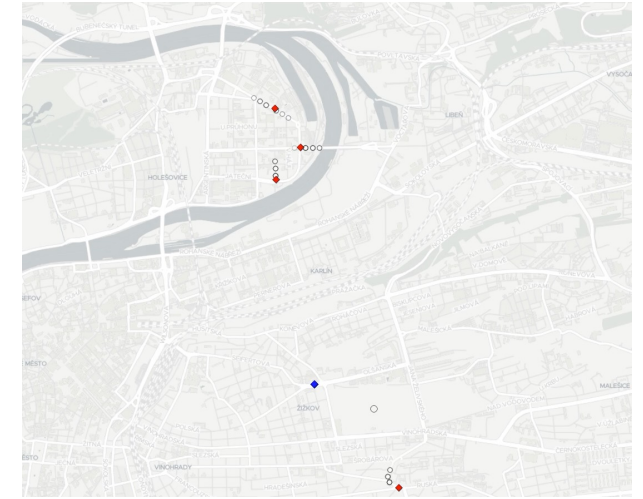
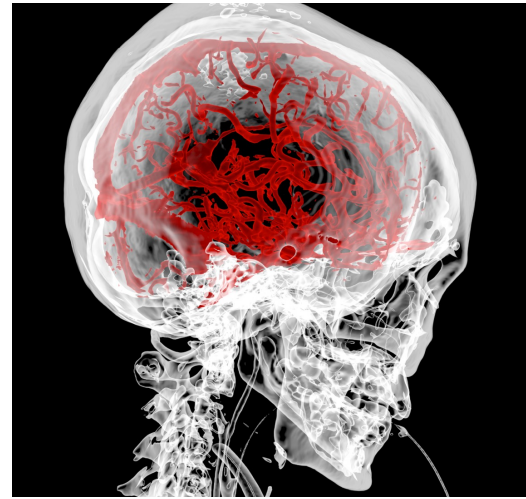
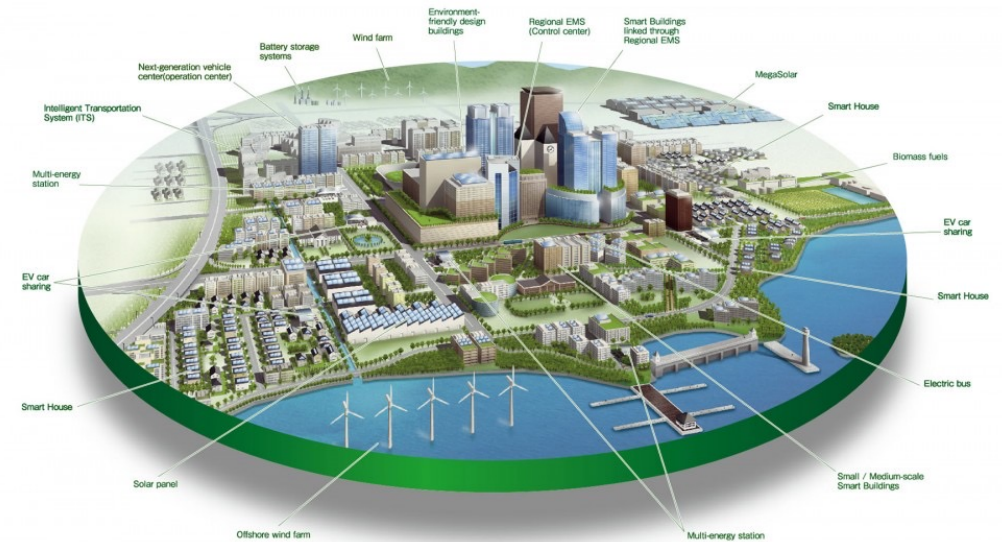
Průmysl



IT4Innovations – Komplexní průmyslové nebo vědecké úlohy

Technologie digitálních dvojčat

- Numerické modely
- Zpracování dat
- Umělá inteligence
- Pokročilé vizualizace
- Propojení a komunikace



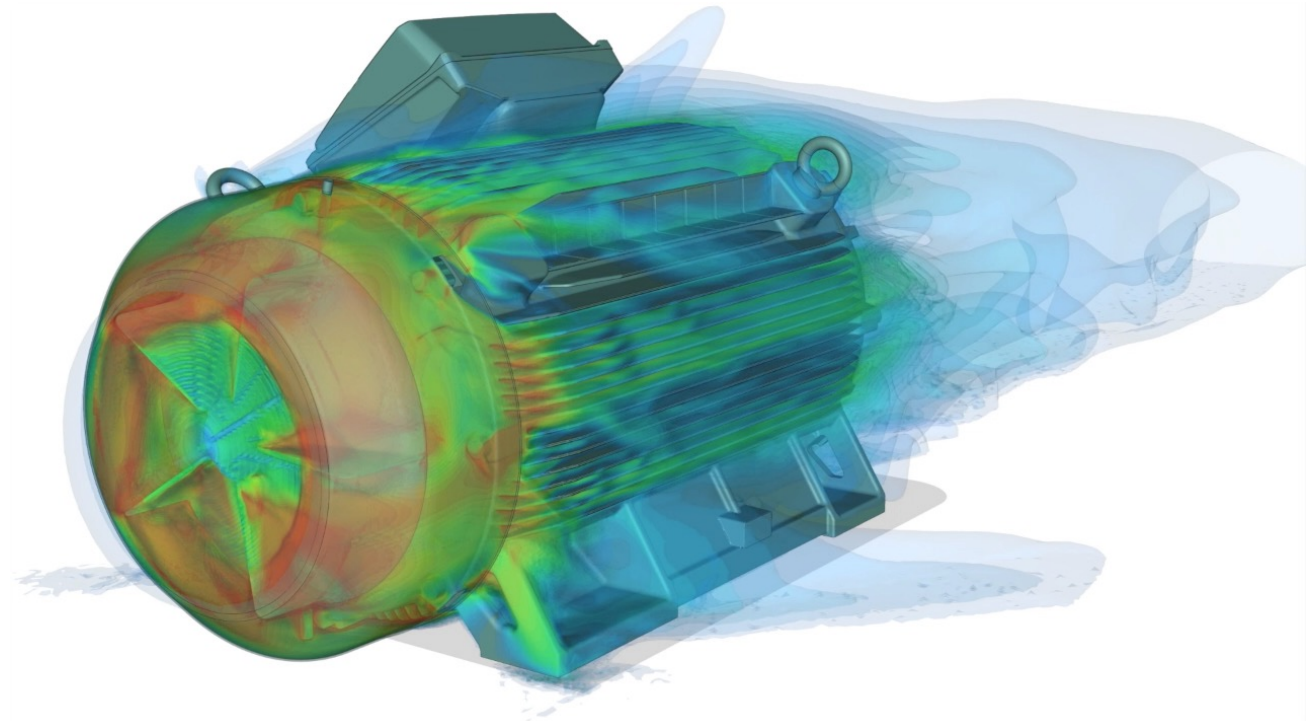
IT4Innovations - Technologie digitálních dvojčat (Digital Twin)

Komplexní nelineární multifyzikální problém – elektrický motor

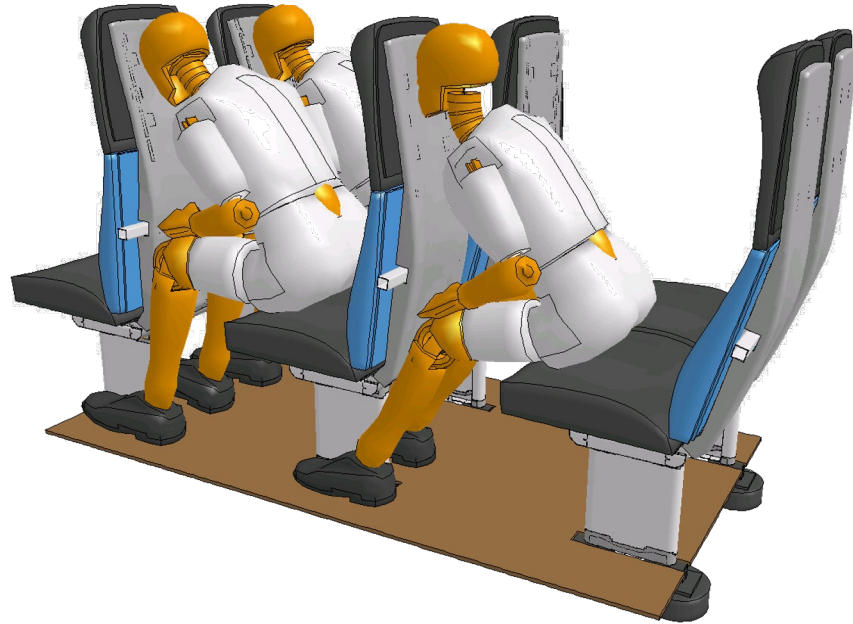
- **Elektrická pole**
- **Elektromagnetismus**
- **Transfer tepla**
 - Teplo generované magnetismem
 - Chladicí systém
- **Strukturální mechanika**
 - Strukturální integrita
 - Vibrace způsobené pohybem
 - Vysokorychlostní motory
 - Ovlivnění elektromagnetismem
- **Aktivní chladicí systém**
 - Proudění vzduchu
- **Akustika**
 - Generovaná prouděním vzduchu
 - Generovaná elektromagnetismem
 - Generovaná vibracemi
- **Predikce únavy materiálu**
- **Inteligentní kontrolní systémy**

1 komplexní přechodná simulace

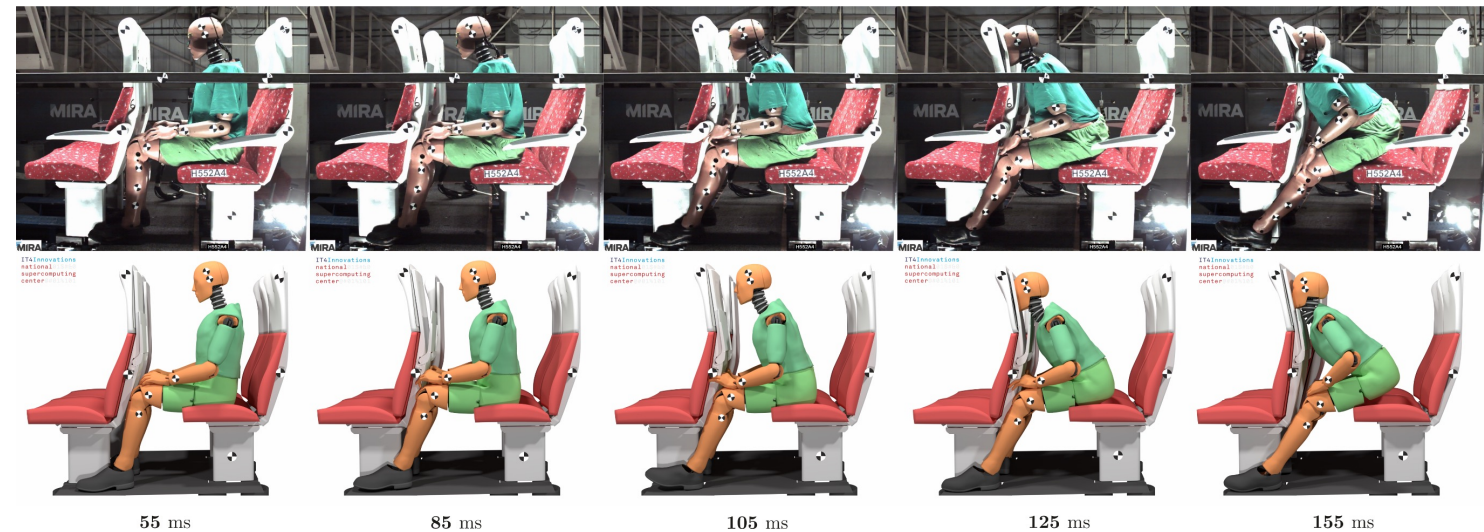
- 35 hodin / 1200 jader na Salomonu
- “Standardní” výkonná počítačová stanice
- 256GB RAM 30 jader ~2 měsíce



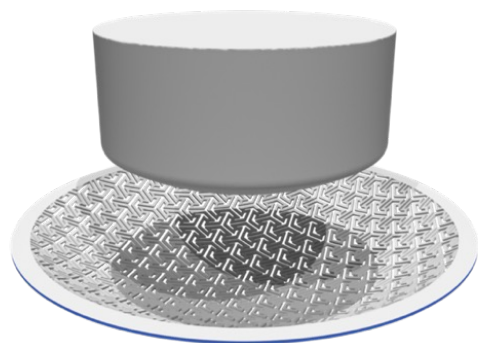
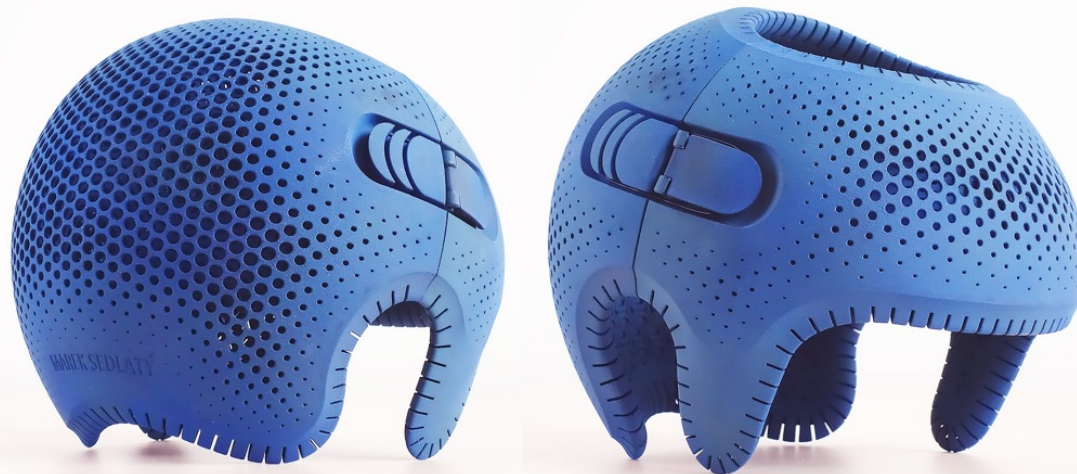
SIEMENS



- Strojírnoství, doprava
- Vývoj vlakových sedaček
- Simulace nárazových zkoušek
- Navrženo několik prototypů
- Certifikace podle normy GM/RT2100



INVENT
MEDICAL



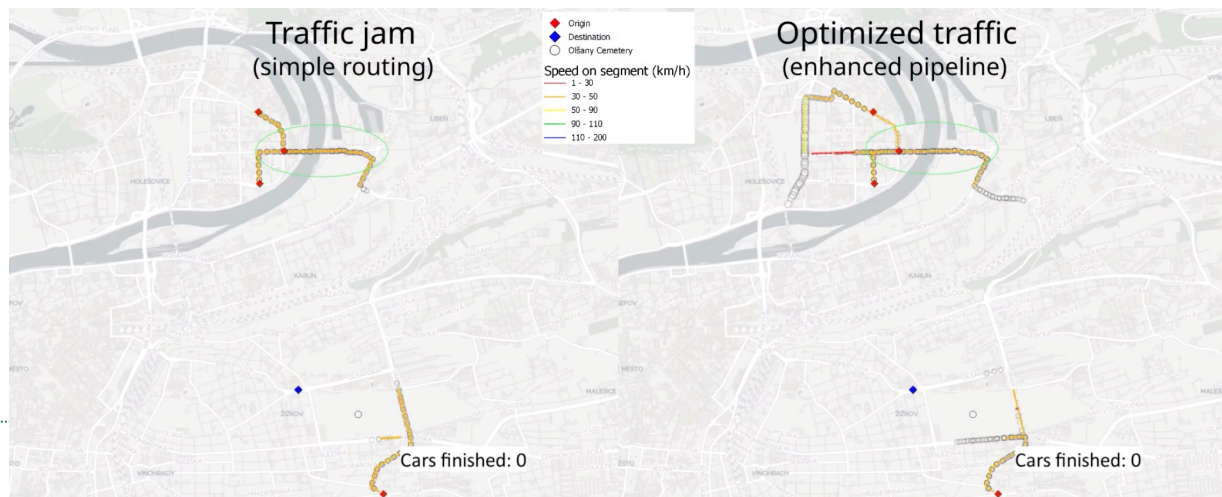
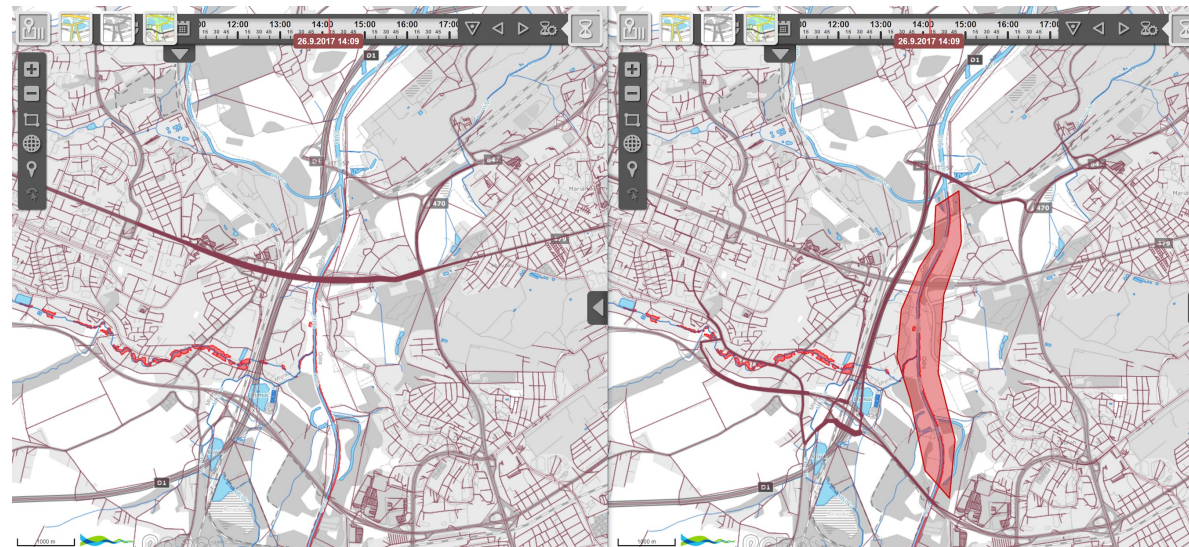
- Zdravotnická technika
- Dětské kraniální ortézy
- Algoritmy pro automatickou úpravu ortéz
- Využití metod numerického modelování pro určení tuhosti ortéz

IT4Innovations - Dopravní simulace



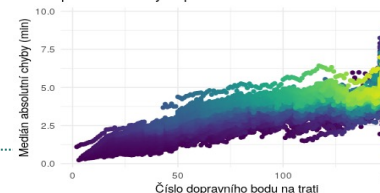
HPC

Self-adaptive navigační systém a globální pohled na dopravní infrastrukturu



IXPERTA

Medián absolutní chyby, skupiny tras které mají průměrnou chybu predikcí nižší než 30 minut



Číslo dopravního bodu v predikci

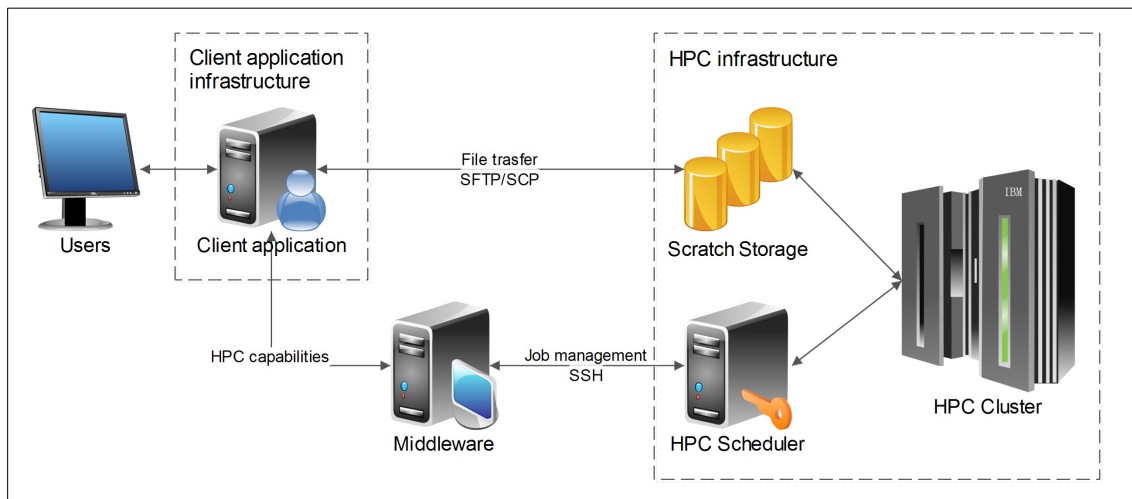
Predikce zpoždění vlaků



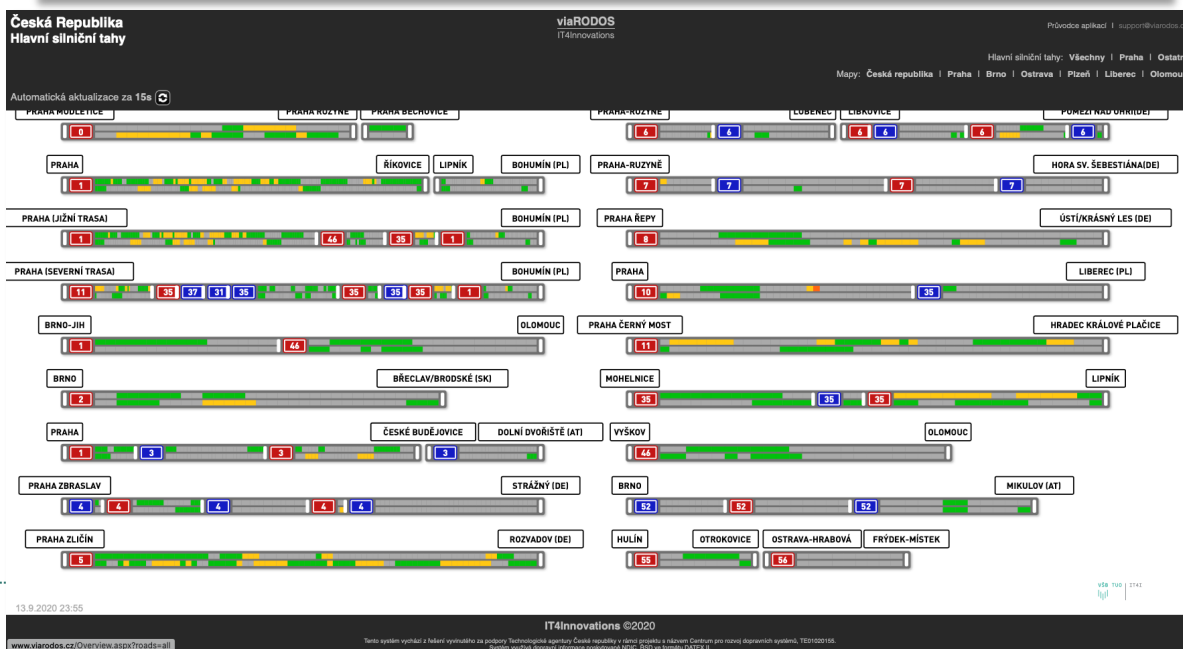
UMĚLÁ INTELIGENCE

IT4Innovations – HPC as a Service

High-End Application Execution Middleware: <https://heappe.eu/web/>



HPC-ready platforma pro masivní paralelní sekvenování DNA

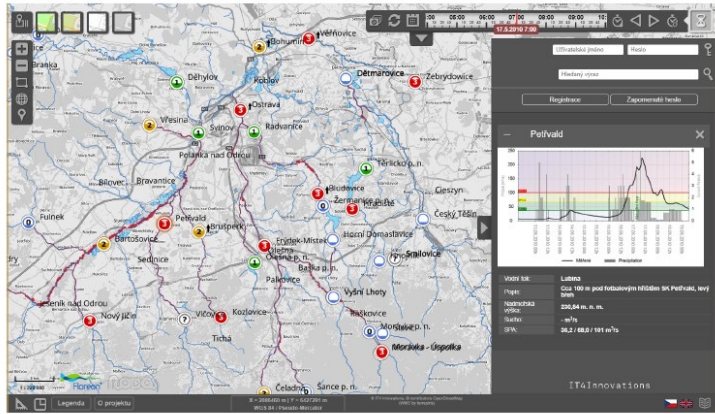


Urban Thematic Exploitation Platform
Zpracování satelitních snímků



FLOREON+

- Decision support system for crisis management domain
 - Floods**
 - Current hydrologic situation monitoring and flood prediction
 - Traffic**
 - Traffic monitoring and modelling
 - Pollution**
 - Monitoring and modelling of spread of hazardous substances
 - Mobility**
 - Monitoring the mobility of the population
 - Landslides**
 - Tracking the movements of elevation points



- HEAppE Middleware
 - Running computationally demanding user-defined What-If analyses on HPC

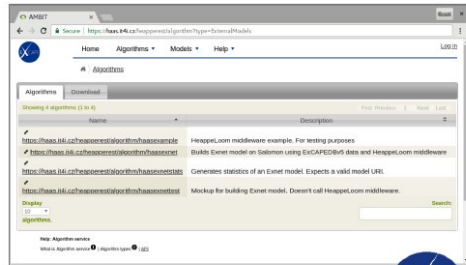


VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM

<https://floreon.eu>

EXCAPE & MOLDIMED

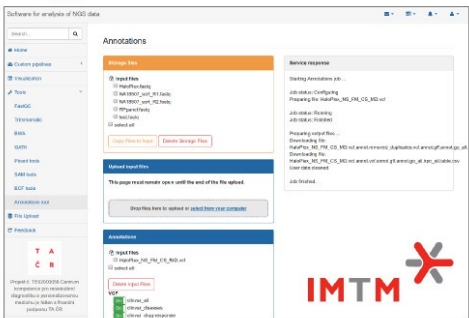
- ExCAPE
 - H2020 projekt Exascale Compound Activity Prediction Engines
 - HEAppE Middleware
 - Part of Drug Discovery Platform enabling execution of drug discovery scientific pipelines on a supercomputer



<http://excape-h2020.eu>



- Moldimed
 - TACR project in the area of molecular diagnostic and personalized medicine
 - HEAppE Middleware
 - Part of the Massive Parallel Sequencing Platform for analysis of NGS data



<https://www.imtm.cz/moldimed>

VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM

FIJI

- Fiji Is Just ImageJ
 - Open-source platform
 - Biological image data processing
 - Build from ImageJ
 - Plugins created by users
 - Large user community

```
Yaml Job
Pipeline config - feature under construction
common
transformation_switch:
  o timelapse
  o timelapse_duplicate
fusion_switch:
  o deconvolution
  o fusion
runtimepoints
```

| Task name | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|-----------------------------|-----|-------------|------------------------------|---|---|---|---|---|---|----|
| Define dataset | | | | | | | | | | |
| Define hdf5 dataset | | | | | | | | | | |
| Resave to hdf5 | | | | | | | | | | |
| Detection and registrati... | | | | | | | | | | |
| Merge xml | | | | | | | | | | |
| Time lapse registration | 232 | Finished | Thu Feb 15 19:02:18 CET 2018 | | | | | | | |
| Average fusion | 233 | Finished | Thu Feb 15 19:07:35 CET 2018 | | | | | | | |
| Define output | 234 | Finished | Fri Feb 16 16:44:12 CET 2018 | | | | | | | |
| Define hdf5 output | 235 | Canceled | Fri Feb 16 17:43:40 CET 2018 | | | | | | | |
| Resave output to hdf5 | 239 | Configuring | Fri Feb 23 10:39:44 CET 2018 | | | | | | | |
| Done | 240 | Running | Fri Feb 23 10:39:48 CET 2018 | | | | | | | |
| | 241 | Queued | Fri Feb 23 10:52:26 CET 2018 | | | | | | | |

| Job id | Status | Creation time | Start time | End Time |
|--------|-------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| 2018 | Created | Thu Feb 15 19:07:35 CET 2018 | Thu Feb 15 19:07:50 CET 2018 | Thu Feb 15 21:07:14 CET 2018 |
| 2018 | Running | Fri Feb 16 16:44:12 CET 2018 | Fri Feb 16 17:12:45 CET 2018 | Fri Feb 16 20:37:38 CET 2018 |
| 2018 | Cancelled | Fri Feb 16 17:43:40 CET 2018 | N/A | N/A |
| 2018 | Configuring | Fri Feb 23 10:39:44 CET 2018 | N/A | N/A |
| 2018 | Running | Fri Feb 23 10:39:48 CET 2018 | N/A | N/A |
| 2018 | Queued | Fri Feb 23 10:52:26 CET 2018 | N/A | N/A |

- HEAppE Middleware
 - Part of Fiji plugin providing unified access to HPC clusters for biological image data processing



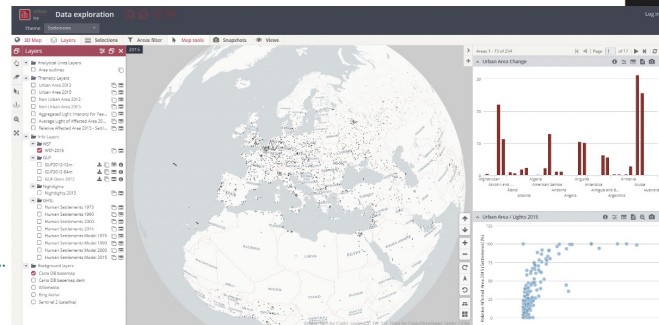
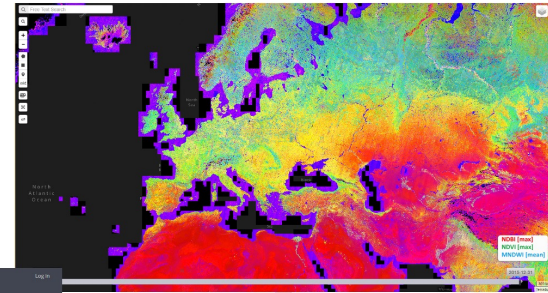
<http://fiji.sc>



VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM

URBAN-TEP

- Urban Thematic Exploitation Platform
 - Financed by European Space Agency
 - Processing services
 - Data storage services
 - User-driven use-case analyses
 - Access, analyse and visualize geospatial data and derived products



- HEAppE Middleware
 - Custom analyses
 - Execution of user-defined scripts in a Singularity environment



<https://urban-tep.eu>

VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM

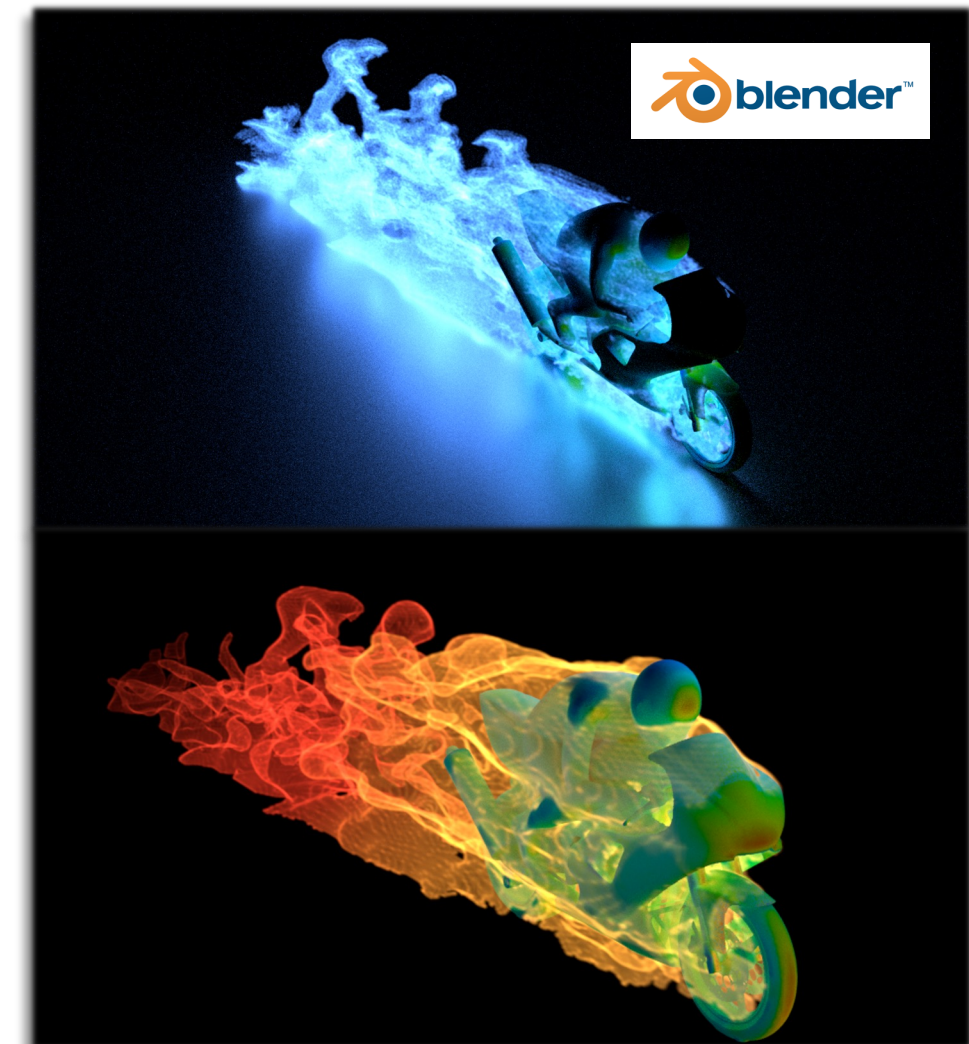
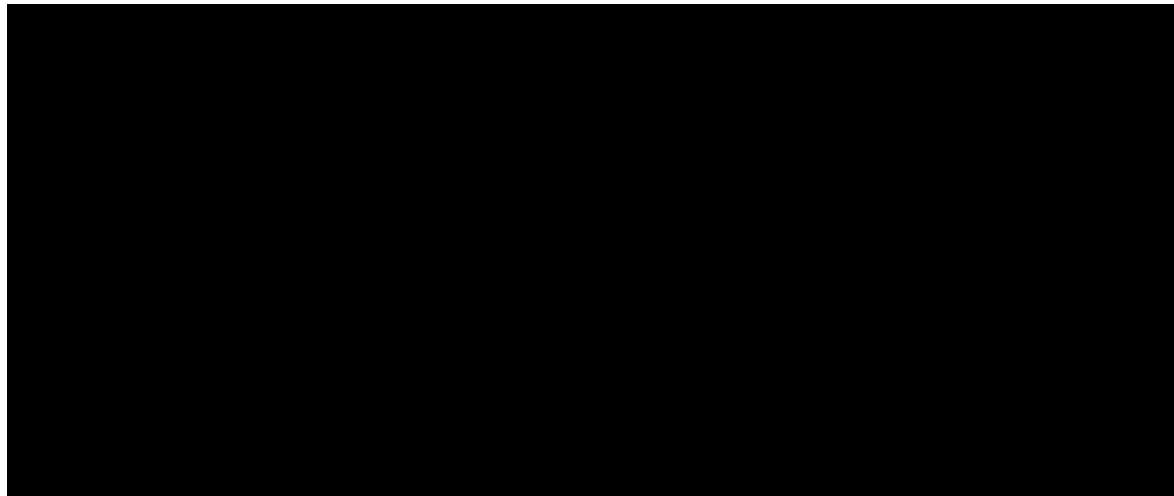
IT4Innovations - Rendering and visualization

VSB TECHNICAL
UNIVERSITY
OF OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NATIONAL SUPERCOMPUTING
CENTER

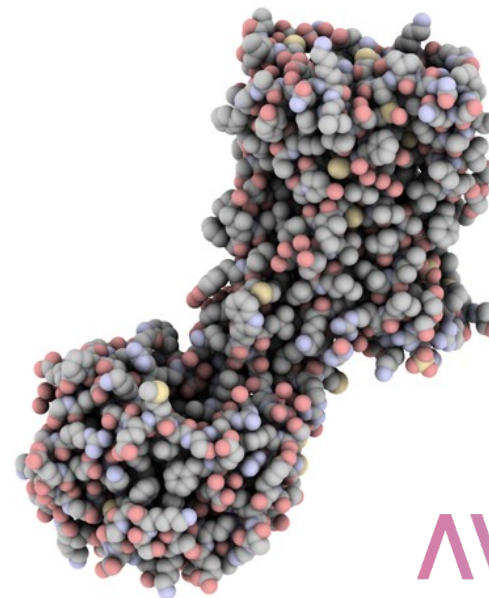
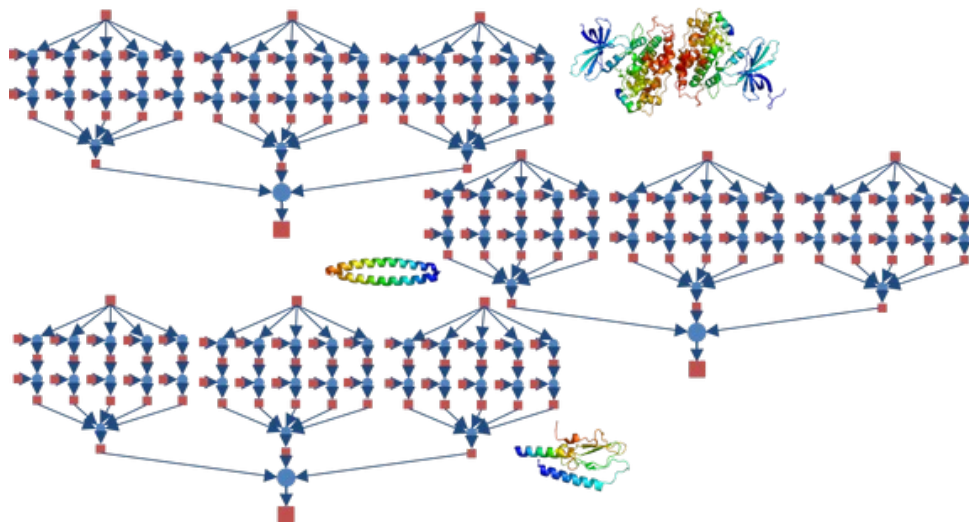
Rendering-as-a-Service Platforma pro superpočítače založený na Blenderu

Vědecké vizualizace pomocí Blender a COVISE



“The Blender Institute conducts open/free software projects and makes open/free movies shared as free culture. National Supercomputing Center IT4Innovations in the Czech Republic is a partner that helped us realise that and it has been appreciated by millions.” - *Ton Roosendaal*

Informační technologie & farmaceutický průmysl



Vývoj nových léčiv, molekulární diagnostika

Výkonnostní testy prokázaly, že HyperLoom umožňuje spouštění plánů obsahujících stovky tisíc úloh s dopředu neznámou délkou běhu na desítkách až stovkách výpočetních uzlů. Tento obecný nástroj navíc nachází další uplatnění i v jiných odvětvích průmyslu.

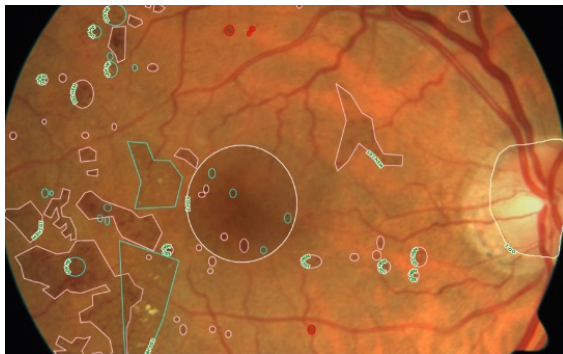
HyperTools



PHARMACEUTICAL COMPANIES
OF *Johnson & Johnson*



Ověření technické proveditelnosti v praxi



Viderize

ZEFEKTIVNĚNÍ
VYŠETŘENÍ SÍTNICE



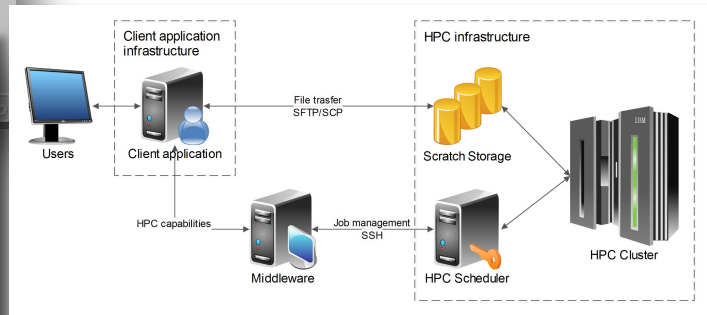
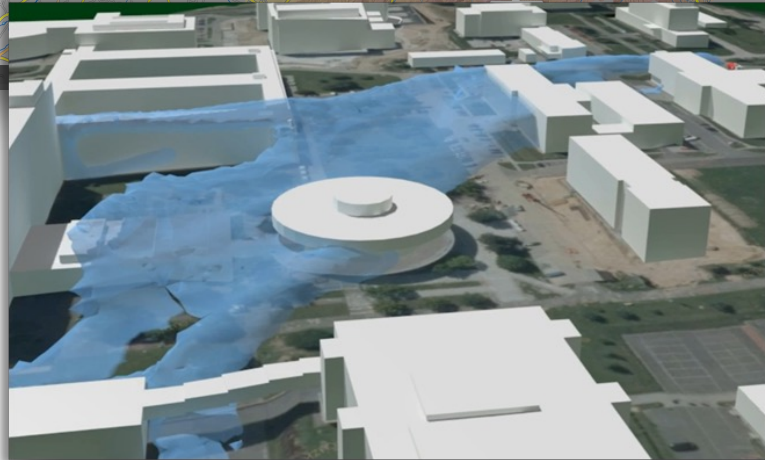
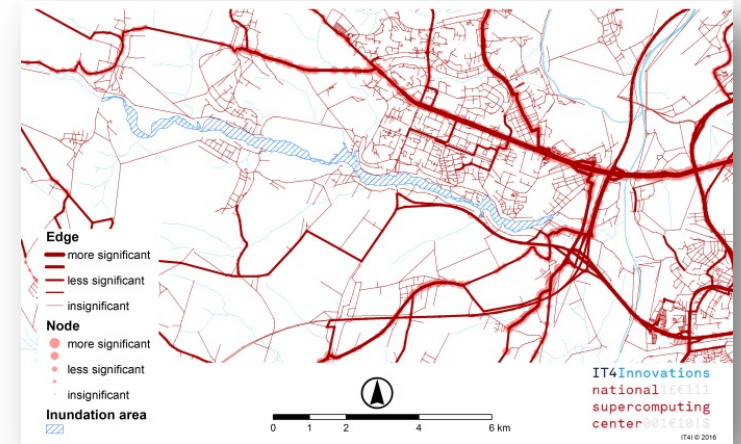
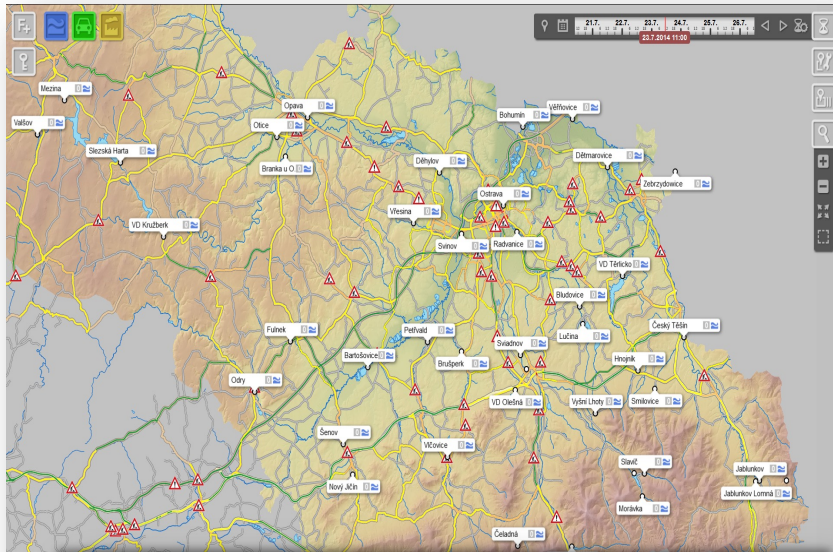
DETEKCE PLEVELE
PLEČKOVACÍ STROJ



MEBSTER

OPTIMALIZACE
EXOSKELETU

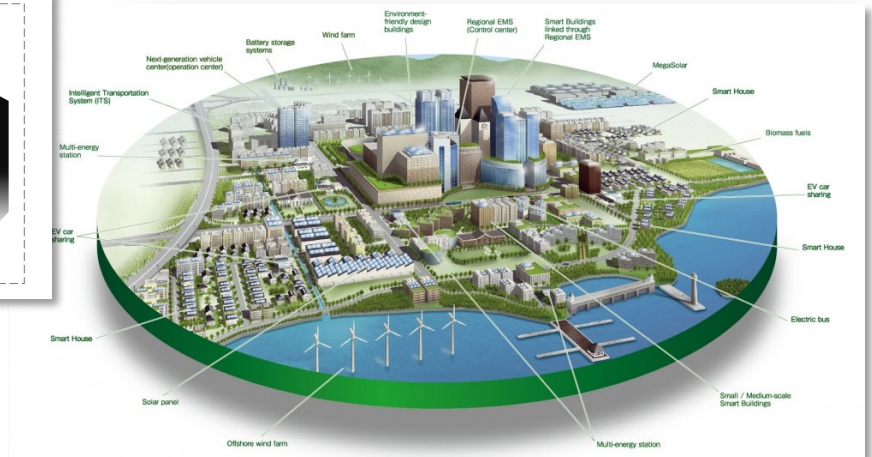
IT4Innovations – Monitoring a modelování dopravy

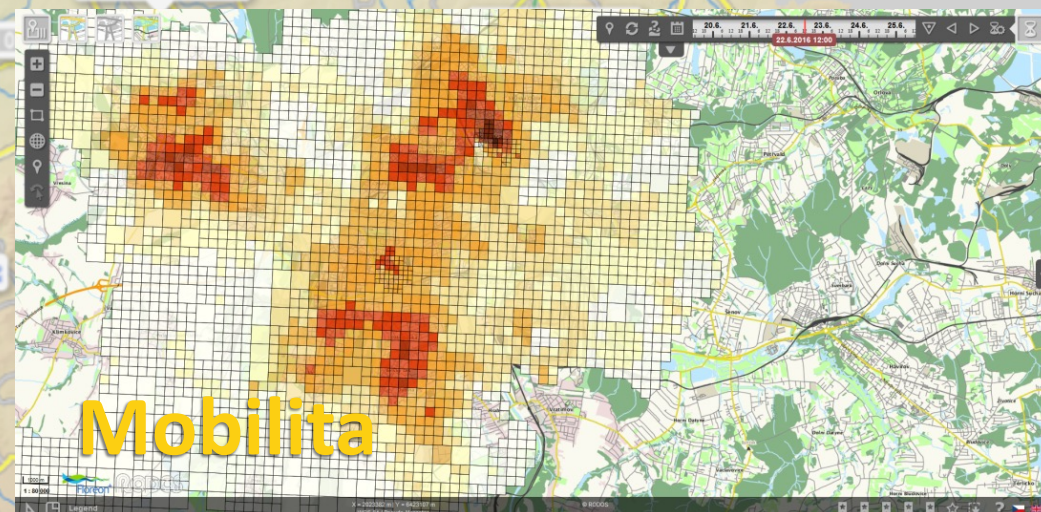
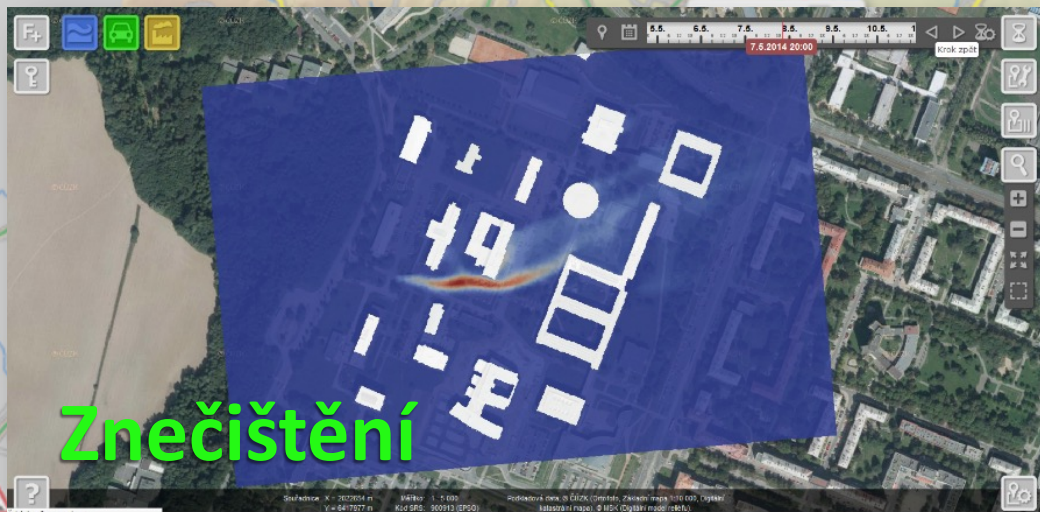
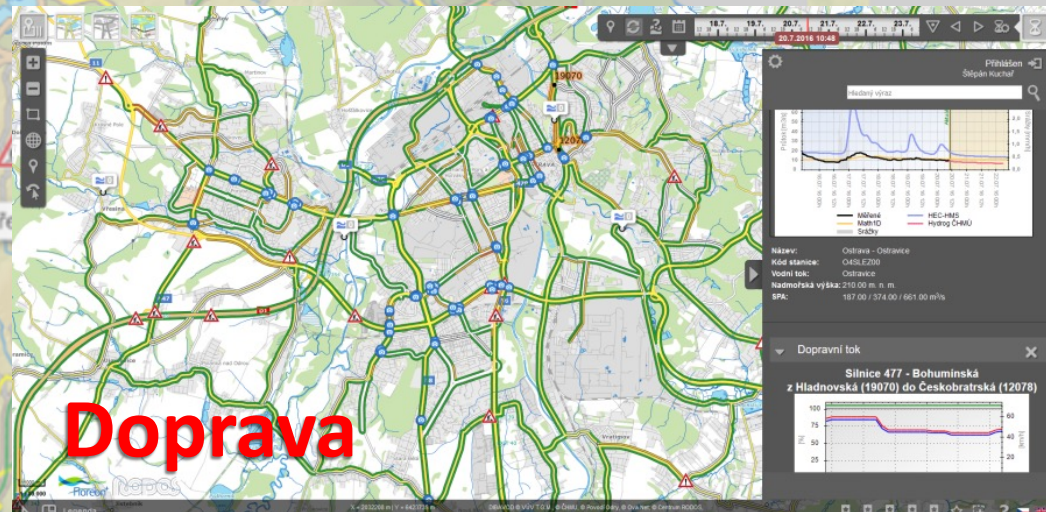


HPC as a Service

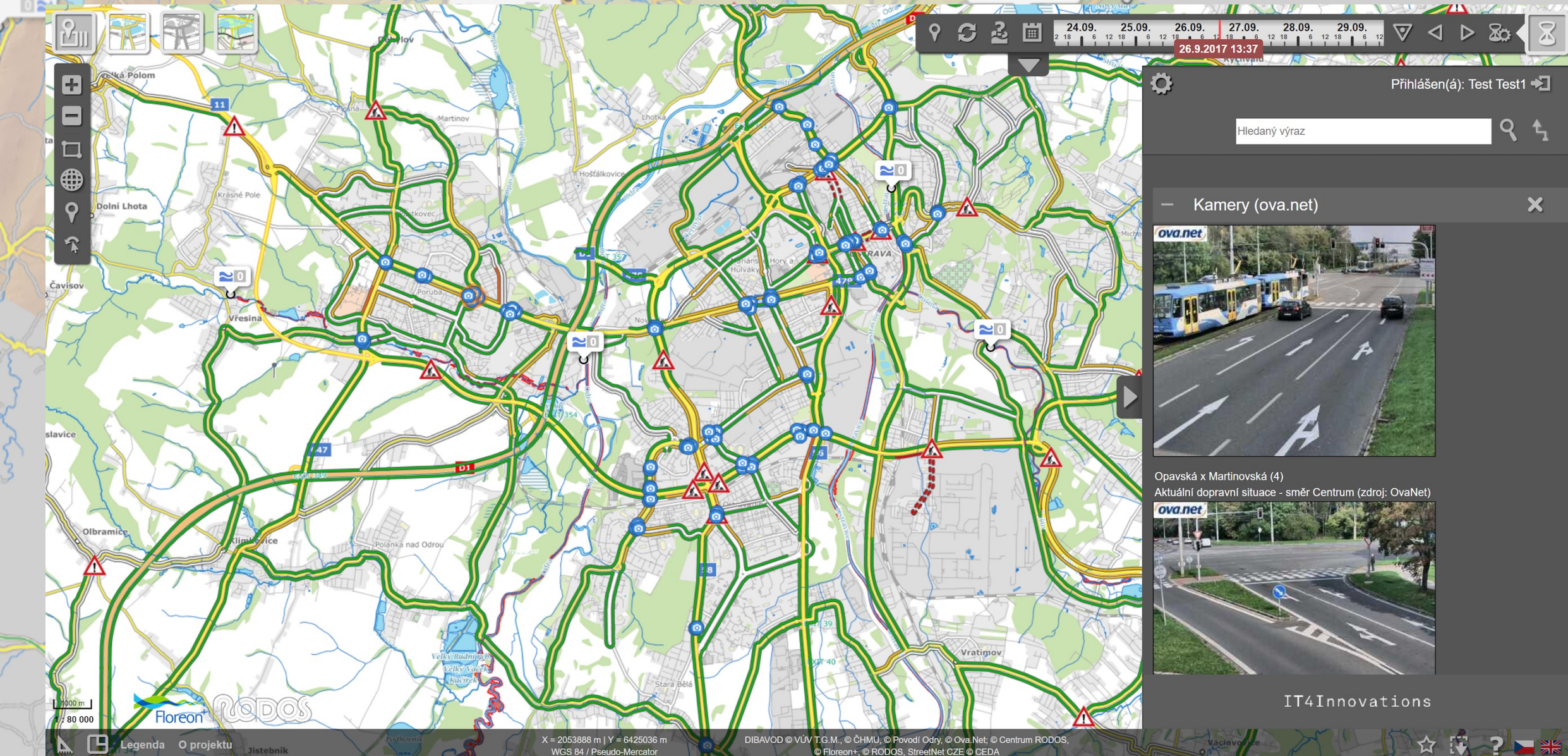


High-End Application Execution Middleware





IT4Innovations – Monitoring dopravy



Map showing traffic monitoring data for a city area, including roads, landmarks, and traffic status indicators (e.g., congestion, accidents).

Calendar view showing dates from 24.09. to 29.09.2017, with a selected date of 26.9.2017 13:37.

Search bar: Hledaný výraz

Camera feed: Kamery (ova.net)

Camera location: Opavská x Martinovská (4)

Actual traffic situation - direction to the center (source: OvaNet)

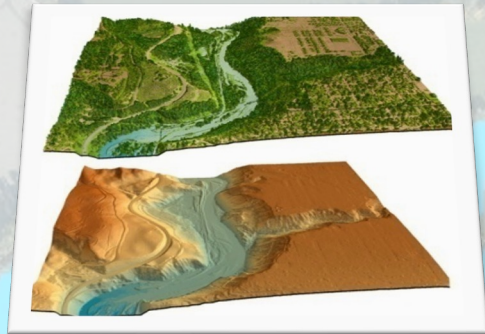
IT4Innovations

Legend, O projektu, Jistebník

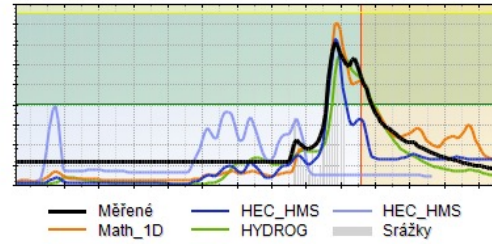
Coordinates: X = 2053888 m | Y = 6425036 m
WGS 84 / Pseudo-Mercator

Data sources: DIBAVOD © VÚV T.G.M., © ČHMÚ, © Povodí Odry, © Ova.Net, © Centrum RODOS, © Floreon+, © RODOS, StreetNet.CZE © CEDA

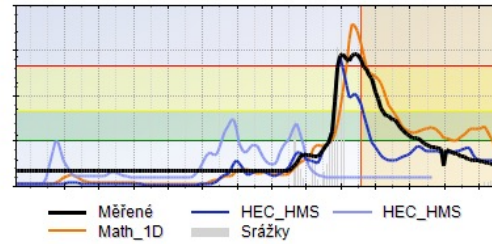
IT4Innovations – Hydrologické modelování



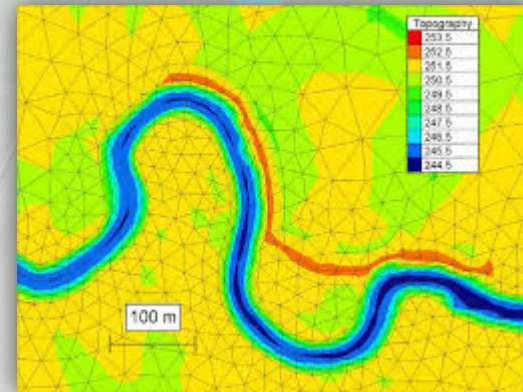
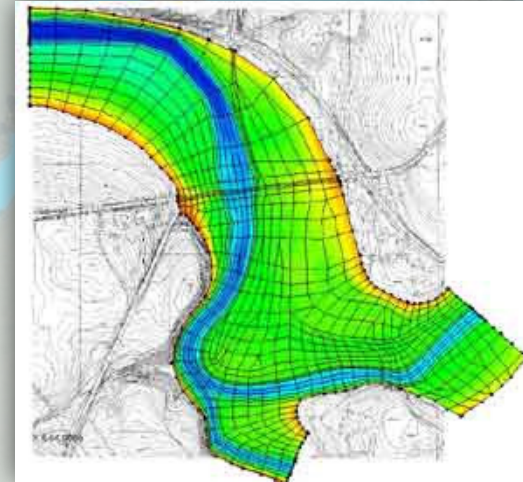
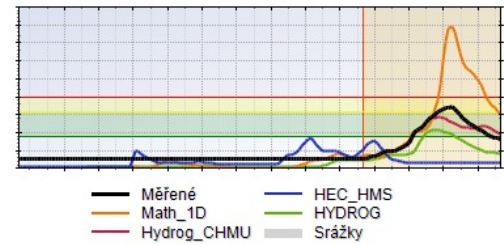
Jablunkov (O4296000)



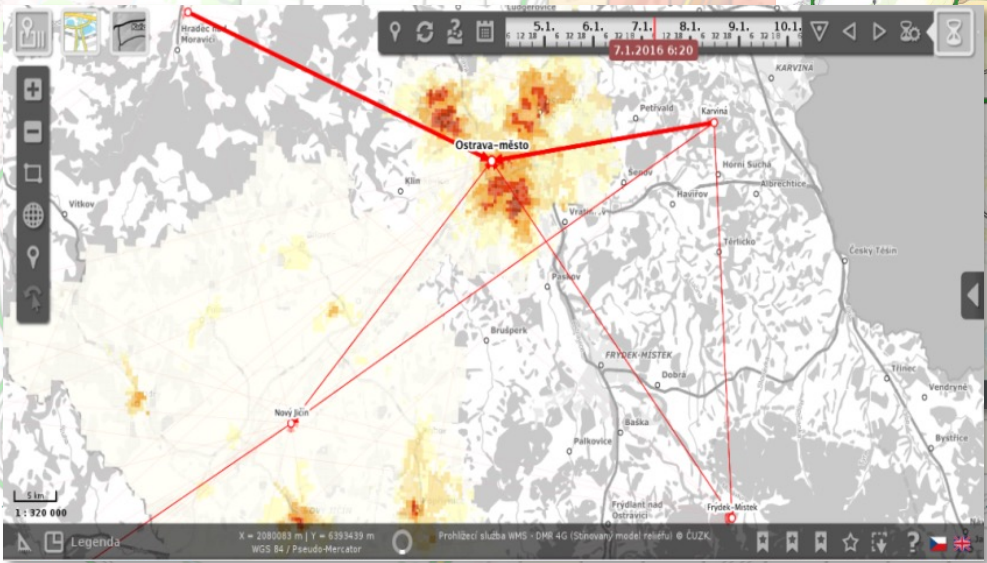
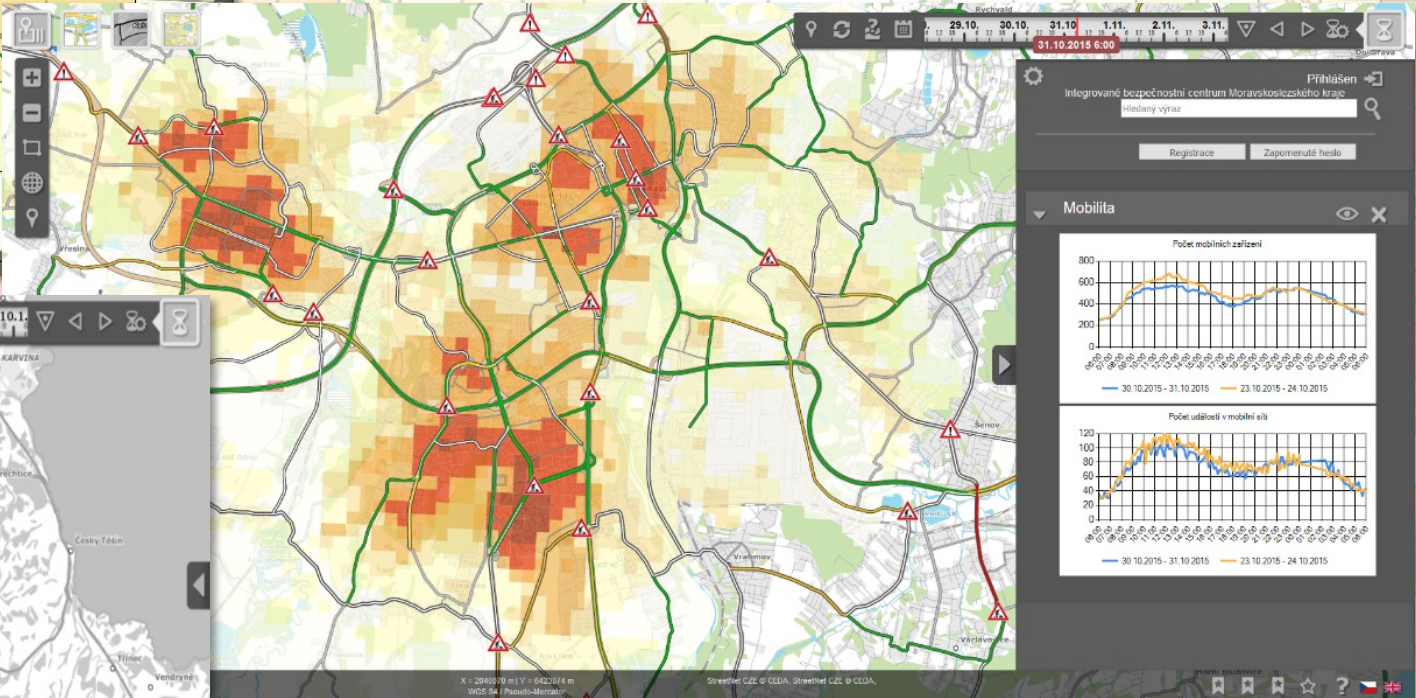
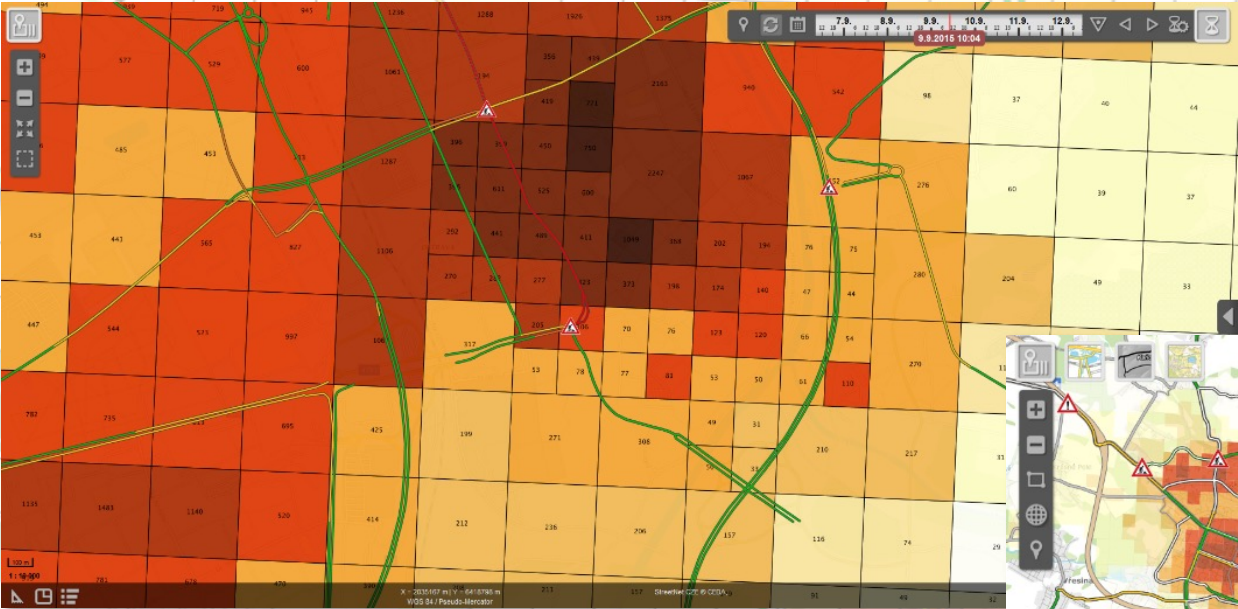
Český Těšín (O4299000)



Věřňovice (O4303000)



IT4Innovations - Mistrovství světa v ledním hokeji 2015



IT4Innovations – LEXIS Platforma

Využití v několika Evropských projektech, LUMI superpočítač

- Zjednodušení přístupu k HPC infrastructure
- Snižování vstupní bariéry pro uživatele (akademici, průmysl, MaSP, ostatní)
- Propojení více zdrojů (HPC, cloud, vice center)
- Zabezpečení přístupu (AAI)

User Profile

First Name: Courtney
Last Name: Galloway
Email Address: courtney.galloway@lexis.com
Assigned to organization with ID: a27b88fc-6ee9-4c4d-88a6-2d8626678993

[Edit](#) [Delete](#) [Back](#)

Project: LEXIS Earthquake and tsunami pilot project

Available/spent core hours:

Available: 18,079
Spent: 28,921

[+ Add resources \(dynamic allocation\)](#) [+ Add resources \(approved\)](#)

Workflow Execution: LEXIS_WFE_1

Workflow Execution Steps Status

| Step | TRAF_run |
|---------------|-----------------------|
| Status | COMPLETED_SUCCESSFULL |
| Task | computation |
| Node name | TRAF |
| Activity type | CallOperation |



Využití HPC pro analýzu velkých dat a pro náročné výpočty

IT4Innovations – Mezinárodní projekty

ICT & HPC

LEXIS

READEX

Runtime Exploitation of Application Dynamism
for Energy-efficient eXascale computing

ANTAR  ^{10¹⁸}

ExaQUTE

Exascale Quantification of Uncertainties for
Technology and Science Simulation

HARPA

Harnessing Performance Variability



Industry support

Cloudi 
Facturing



sesame  net

SUPERCOMPUTING EXPERTISE FOR
SMALL & MEDIUM ENTERPRISE NETWORK

Education



IPROCOM

Infrastructure



IT4Innovations – Mezinárodní projekty

VSB TECHNICAL
UNIVERSITY
OF OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NATIONAL SUPERCOMPUTING
CENTER

ICT & HPC



Industry support



Infrastructure

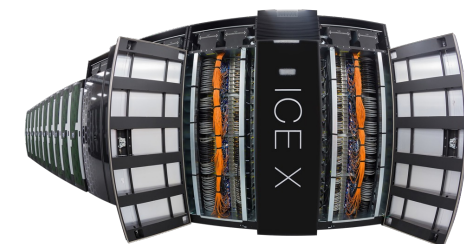


Education





HPC & HPDA infrastruktura & služby
Nejvýkonnější veřejná superpočítačová infrastruktura v České republice
Digitální Inovační Hub Ostrava – IT4I & MSIC



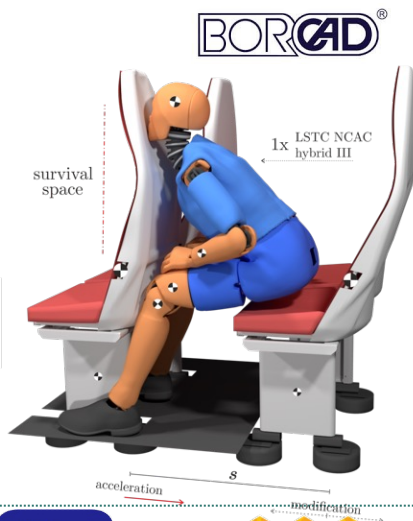
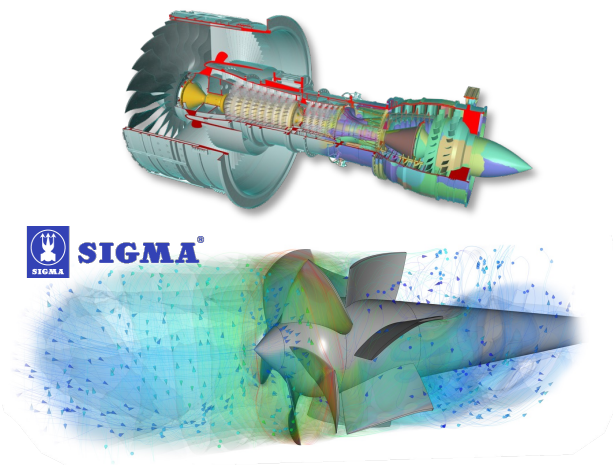
Poskytovatel infrastruktury ★ HPC program ★ Výzkumná spolupráce ★ Kurzy & vzdělávání

Pokročilé výpočty
a simulace

Virtuální prototypy
Digitální dvojčata

Big data
Strojové učení

Vizualizace
Virtuální realita



IT4Innovations – Spolupráce s průmyslem



<https://www.it4i.cz/spoluprace-s-prumyslem/priklady-spoluprace>

Děkuji za pozornost

Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.

VSB TECHNICAL UNIVERSITY OF OSTRAVA | **IT4INNOVATIONS NATIONAL SUPERCOMPUTING CENTER**

Deputy head of Advanced Data Analysis and Simulations lab
IT4Innovations National Supercomputing Center
VSB – Technical University of Ostrava
katerina.slaninova@vsb.cz
www.it4i.cz
