

hpc focus



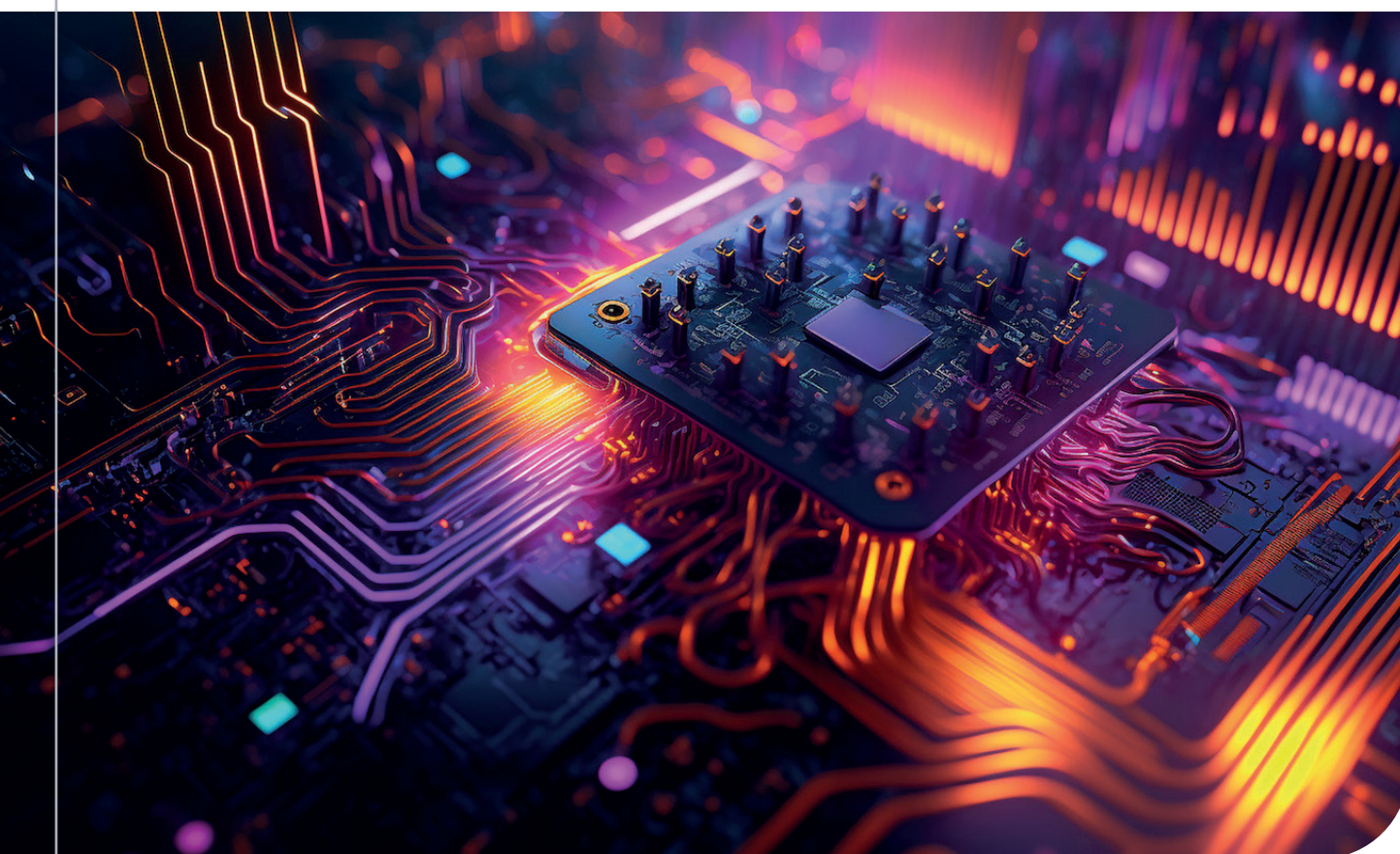
Úvodné slovo redakcie

Vážení používatelia a používateľky, všetci priaznivci HPC,

kým EuroHPC JU (spoločný európsky podnik pre vysokovýkonné počítanie) začiatkom leta oznámil, že vo Francúzsku bude vybudovaný už druhý európsky exascale superpočítač (prvý bude v Nemeckom Jülichu) – my na Slovensku sa tešíme aspoň zo spustenia HPC systému Devana. Rôzne nepredvídateľné okolnosti vrátane opakovania verejného obstarávania, čakania na niektoré komponenty a dlhšie obdobie prípravy a testovania spôsobili, že slovenskí používatelia sa dočkali prístupu k novému HPC systému o čosi neskôr. Napriek tomu veríme, že nebude núdza o kvalitné projektové návrhy a že výkon Devany, ktorý je 800 TFlop/s bude využitý kontinuálne a naplno.

V štádiu intenzívnych príprav je aj projekt ďalšieho slovenského superpočítača s pracovným názvom Perun, ktorý bude obstaraný z prostriedkov plánu obnovy a odolnosti. Ten by mal mať výkon približne 50 PFlop/s a funkčný by mal byť už koncom roka 2025, pričom sa nezabudlo ani na opatrenia pre rozvoj ekosystému a podporu vývoja a výskumu opierajúceho sa o HPC technológie.

Tieto investície do infraštruktúry – hoci sú určite potrebné – sú však len jednou súčasťou skladačky, ktorej výsledkom má byť obraz uceleného rozvoja HPC. Ďalšou kľúčovou - a opomínanou - časťou je zabezpečenie stabilnej prevádzky a služieb, čo v prípade HPC technológií znamená ročne nemalé finančné náklady. Práve výška prostriedkov, ktoré je prevádzkovateľ schopný a ochotný vynaložiť počas životnosti systému by mala byť dôležitým parametrom pre



samotnú investíciu do hardvéru. Kolko je to momentálne na Slovensku nie je jasné, hoci od toho závisí kto, za akých podmienok a okolností vôbec HPC systémy môže využívať. Práve spustenie Devany a príprava Peruna je príležitosťou na vytvorenie národnej stratégie rozvoja HPC, ktorá by mala širokú podporu zástupcov používateľov a predovšetkým by mohla rátať so súčinnosťou relevantných orgánov verejnej správy pri samotnej implementácii. Tento krok by umožnil Slovensku byť rovnocenným partnerom iným európskym krajinám a slovenským vedcom a výskumníkom držať krok s európskymi kolegami pri riešení komplexných problémov v rôznych odboroch.

O momentálne platnej politike prístupu k HPC si viac môžete prečítať aj na týchto stránkach. Zároveň pozývame súčasných aj nádejných používateľov – vrátane tých z malých a stredných podnikov – využiť Devanu na riešenie svojich výskumných a vývojových projektov, a tešíme sa na spoluprácu!

Lucia Demovičová



Strana 04 – 19

HPC

Článok o možnostiach prístupu na Devanu a jej aplikačnom vybavení. Rozhovor s Piotrom Rydlichowskim, koordinátorom projektov kvantových technológií v Superpočítačovom a sieťovom centre v Poznani.

Strana 20 – 61

APLIKÁCIE V PRAXI

Články oslovených užívateľov superpočítača AUREL.

Strana 62 – 67

POPULARIZÁCIA HPC

Krátke správy o významných stretnutiach a udalostiach, na ktorých sa zúčastnilo či participovalo NSCC.

46 Terabit/sec
Optical Backplane

01

NSCC
NCC PRE HPC
EUROHPC

DEVANA

**NOVÝ SLOVENSKÝ SUPERPOČÍTAČ
SPRÍSTUPNÝ
PRE VÝSKUM A INOVÁCIE**



01

Prístup a služby

Pre slovenskú vedeckú a výskumnú komunitu sa začala nová éra HPC služieb a to vďaka nedávno sprístupnenému superpočítaču Devana. Devana bola obstaraná v rámci projektu z názvom Národné kompetenčné centrum pre vysokovýkonné počítanie (číslo projektu v systéme ITMS2014+: 311071AKF2), ktorý je financovaný z Európskeho fondu regionálneho rozvoja, Štrukturálnych fondov EÚ Informatizácia spoločnosti, konkrétne z operačného programu Integrovaná infraštruktúra 2014-2020. Jej využitie však nie je obmedzené len pre akademickú obec, naopak, systém je prístupný pre súkromné spoločnosti aj verejnú správu. V tomto článku priblížime praktické informácie pre súčasných aj budúcich používateľov.

V prvom rade je potrebné zdôrazniť, že spomínaná nová éra nespočíva len v novom superpočítači – v snahe priblížiť sa európskej úrovni tím Výpočtového strediska SAV a Národného superpočítačového centra pripravili aj nový ucelený koncept služieb v oblasti HPC, ktorý sa bude postupne realizovať s dôrazom na ich dostupnosť a kvalitu. Už teraz je prístupný nový používateľský a registračný portál, prehľadný web s praktickými návodmi a používateľská podpora prostredníctvom helpdesku na báze „next business day“.

Kto a akým spôsobom môže Devanu používať je definované politikou prístupu, ktorá sa odvíja od možností prevádzkovateľa a môže sa meniť. Aktuálne platí, že všetky projekty, ktoré patria striktne pod otvorený výskum a vývoj, môžu byť realizované bezplatne, či už je riešiteľom zamestnanec univerzity alebo pracovník súkromnej firmy. Časť výpočtovej kapacity je tiež vyčlenená pre komerčné použitie a aj pre klientov dvoch slovenských ECDI (Európske centrá digitálnych inovácií) – [Hopero](#) a [Centrum inovatívneho zdravotníctva](#). ECDI poskytujú podnikom okrem iného aj výpočtovú kapacitu Devany v rámci schémy štátnej pomoci, teda tiež bezplatne. Predovšetkým malé a stredné podniky, ale aj väčšie priemyselné spoločnosti majú navyše možnosť využiť služby [Národného kompetenčného centra pre HPC](#) a realizovať proof-of-concept a pilotné projekty s odborníkmi na oblasť HPC, ktorí bezplatne pomôžu s vývojom

Už teraz je prístupný nový používateľský a registračný portál, prehľadný web s praktickými návodmi a podpora prostredníctvom helpdesku na báze „next business day“.

a nasadením rôznych riešení v HPC prostredí, s paralelizáciou, diagnostikou a optimalizáciou softvéru.

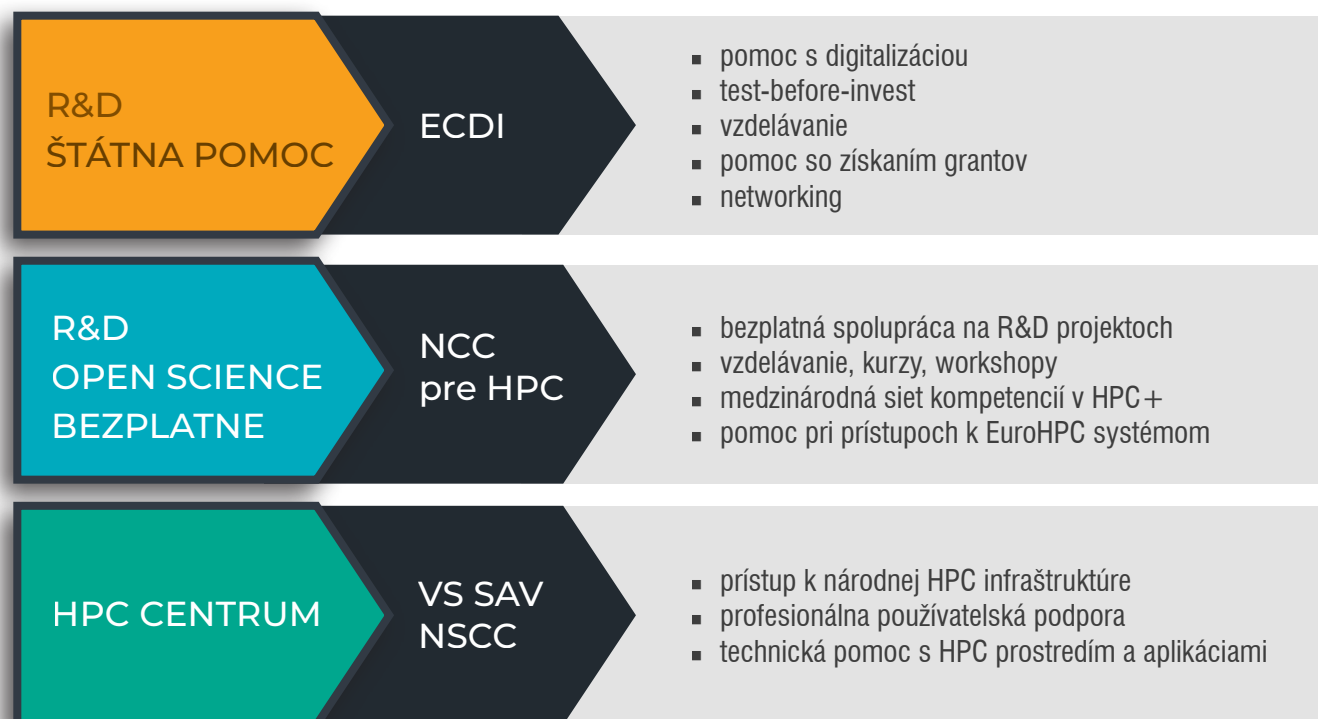


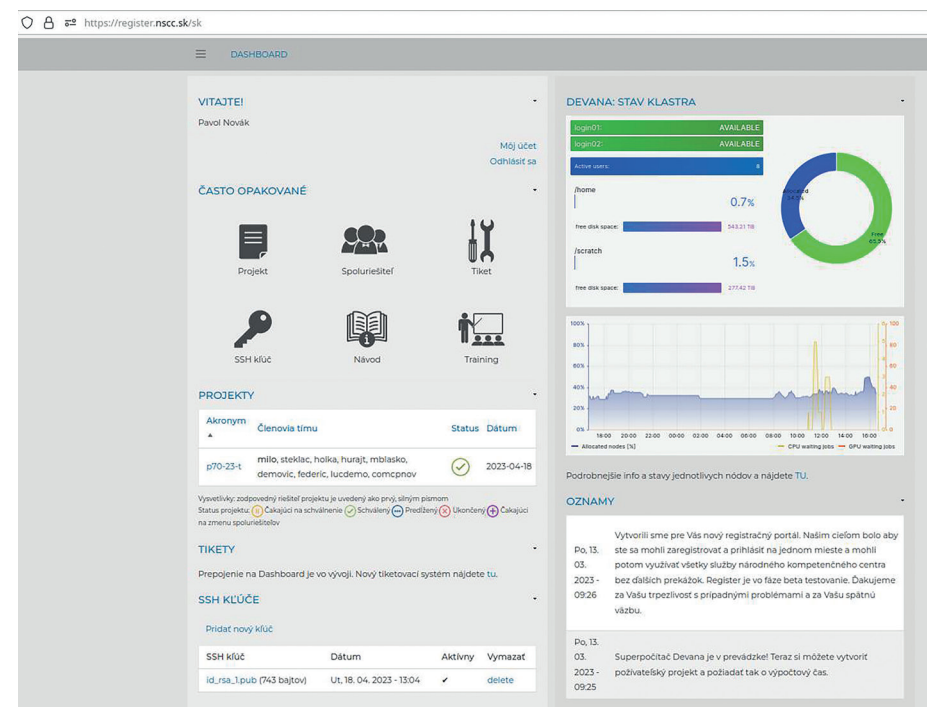
SCHÉMA 1

Aktuálny prehľad HPC služieb a poskytovateľov na Slovensku.

02

Ako začať

Ako prvý krok je potrebné vytvoriť si používateľské konto v HPC portáli register.nsc.sk. Po odoslaní registračného formulára je nutné počkať na overenie a notifikáciu, následne je v portáli možné podať žiadosť o prístup k samotnej výpočtovej infraštruktúre v rámci rôznych typov projektov, manažovať svoje projekty a SSH kľúče a sledovať čerpanie pridelených alokácií v jednotlivých projektoch riešiteľa. Nachádzajú sa tu aj linky na Helpdesk a „knowledge-base“ stránku s inštrukciami a návodmi. Výpočtový čas je možné získať pre konkrétny projekt v rámci jednej z nasledovných možností: projekty pre testovanie a benchmarking, štandardné projekty a komerčné projekty. O prístup pre testovací projekt je možné žiadať kedy-



OBRÁZOK 1

Ukážka dashboardu v používateľskom konte HPC portálu.

koľvek počas roka, jeho cieľom by mal byť benchmarking a získanie dát pre následné podanie štandardného projektu - tomu zodpovedá aj nižší objem výpočtovej kapacity určenej pre tento typ projektov a rýchly proces technického hodnotenia. Uzávierka žiadostí pre štandardné projekty, ktoré sú komplexnejšie a adresujú konkrétne vedecké a výskumné ciele, bude trikrát do roka. Tieto projekty prechádzajú technickým hodnotením a tiež peer-review hodnotením nezávislými odborníkmi v konkrétnych oblastiach. Dĺžka projektu je jeden rok s možnosťou následného predĺženia. Pre realizáciu komerčného projektu je potrebné najskôr uzavrieť individuálnu zmluvu s prevádzkovateľom podľa všeobecných obchodných podmienok a aktuálneho cenníka.

Podrobnejšie praktické informácie o prístupe, HPC systémoch, softvérovom prostredí vrátane manuálov, dokumentácie a efektívnemu používaniu aplikácií nájdu používatelia aj zúčastnení už teraz na webovej stránke userdocs.nsc.sk. Prístup na samotný HPC systém je možný cez terminál s príkazovým riadkom, no najnovšie už aj cez webové rozhranie. Prístup cez webový prehliadač umožňuje nová služba Open OnDemand, ktorá ponúka používateľsky priateľské grafické prostredie pre manažment súborov, spúšťanie výpočtových úloh a zároveň možnosti interaktívneho počítania s využitím aplikácií Devana Desktop, Jupyter Notebook alebo RStudio Server.

Devana je vybavená štandardnými matematickými knižnicami a kompilátormi vrátane foss (free and open source software) a intel (Intel based) toolchainov.

03

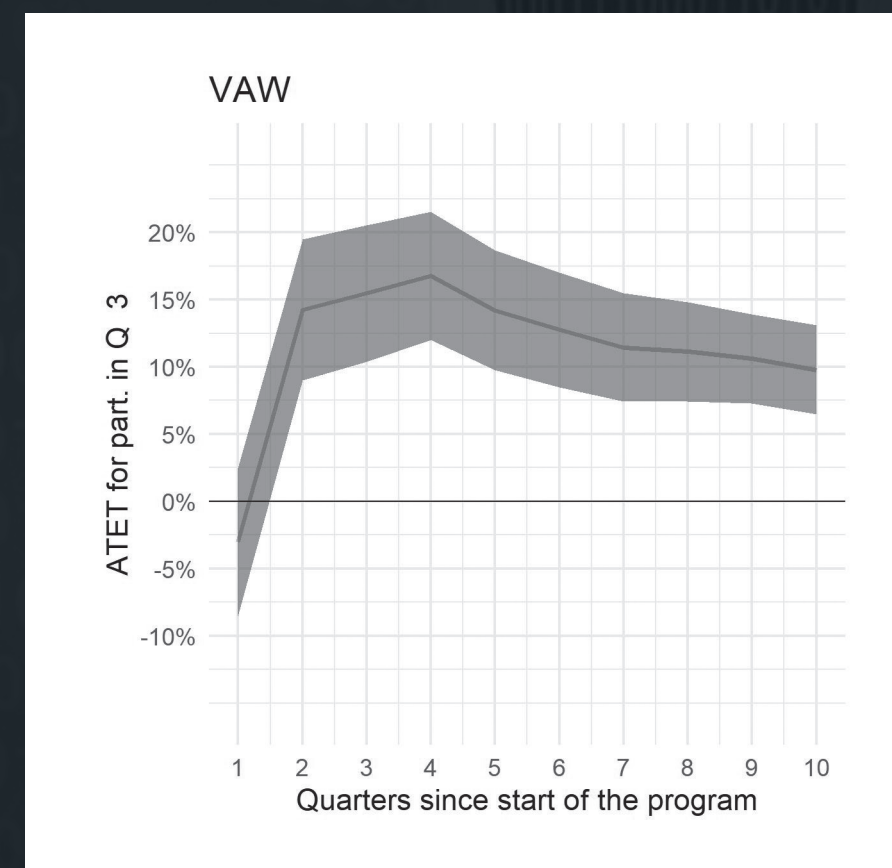
Aplikačné vybavenie

Devana je vybavená štandardnými matematickými knižnicami a kompilátormi vrátane foss (free and open source software) a intel (Intel based) toolchainov. Používatelia môžu na spúšťanie výpočtových úloh využiť aj platformu pre kontajnerizáciu (virtualizáciu na úrovni operačného systému) Singularity. Kontajnerizácia umožňuje používateľovi mať kontrolu nad prostredím a „zabaliť“ svoj softvér do jedného súboru – kontajnera, ktorý je prenosný a reprodukovateľný naprieč rôznymi platformami. Pomocou Singularity je možné vytvoriť kontajner napríklad na svojom notebooku a potom ho spustiť na HPC systéme.

Používatelia môžu používať vlastné softvérové vybavenie, pokiaľ disponujú zodpovedajúcou licenciou. Vybrané open-source aplikácie, ktoré doteraz patrili medzi najpoužívanejšie, sú dostupné už v súčasnosti, pričom personál HPC centra poskytuje pomoc s inštaláciou potrebného softvéru na základe požiadaviek používateľov. V rámci uvedeného projektu Národné kompetenčné centrum pre vysokovýkonné počítanie (číslo projektu: 311071AKF2) sa tiež podarilo obstaráť populárny softvér pre multifyzikálne inžinierske simulácie Ansys, ktorý je už používateľom k dispozícii. Prehľad dostupných aplikácií a modulov je priebežne aktualizovaný na userdocs.nsc.sk.



V rámci uzavretého testovania (closed beta) pred ostrým spustením prístupu sme oslovili niekoľko dobrovoľníkov, ktorí nám pomohli otestovať správanie systému pri rôznych typoch záťaží a vyladiť používateľské prostredie:



OBRÁZOK 2

Ekonomický ústav SAV používa pri svojom výskume rôzne štatistické metódy a projektom DynamicALMP teraz testuje aj využitie HPC prostriedkov pre spracovanie rozsiahlych datasetov. Pripravujú odhad modelu dopadov účasti v opatreniach aktívnej politiky trhu práce. Model je odhadovaný na základe administratívnych dát o registrovaných nezamestnaných. Použitý je dynamický estimátor zohľadňujúci rozdielnu kompozíciu účastníkov s meniacou sa s dĺžkou zotrvania v nezamestnanosti. Bootstrapovanie chýb odhadnutých koeficientov pri dostatočnom počte opakovaní už naráža na možnosti bežných PC, preto je potrebné workload preniesť do HPC prostredia.“

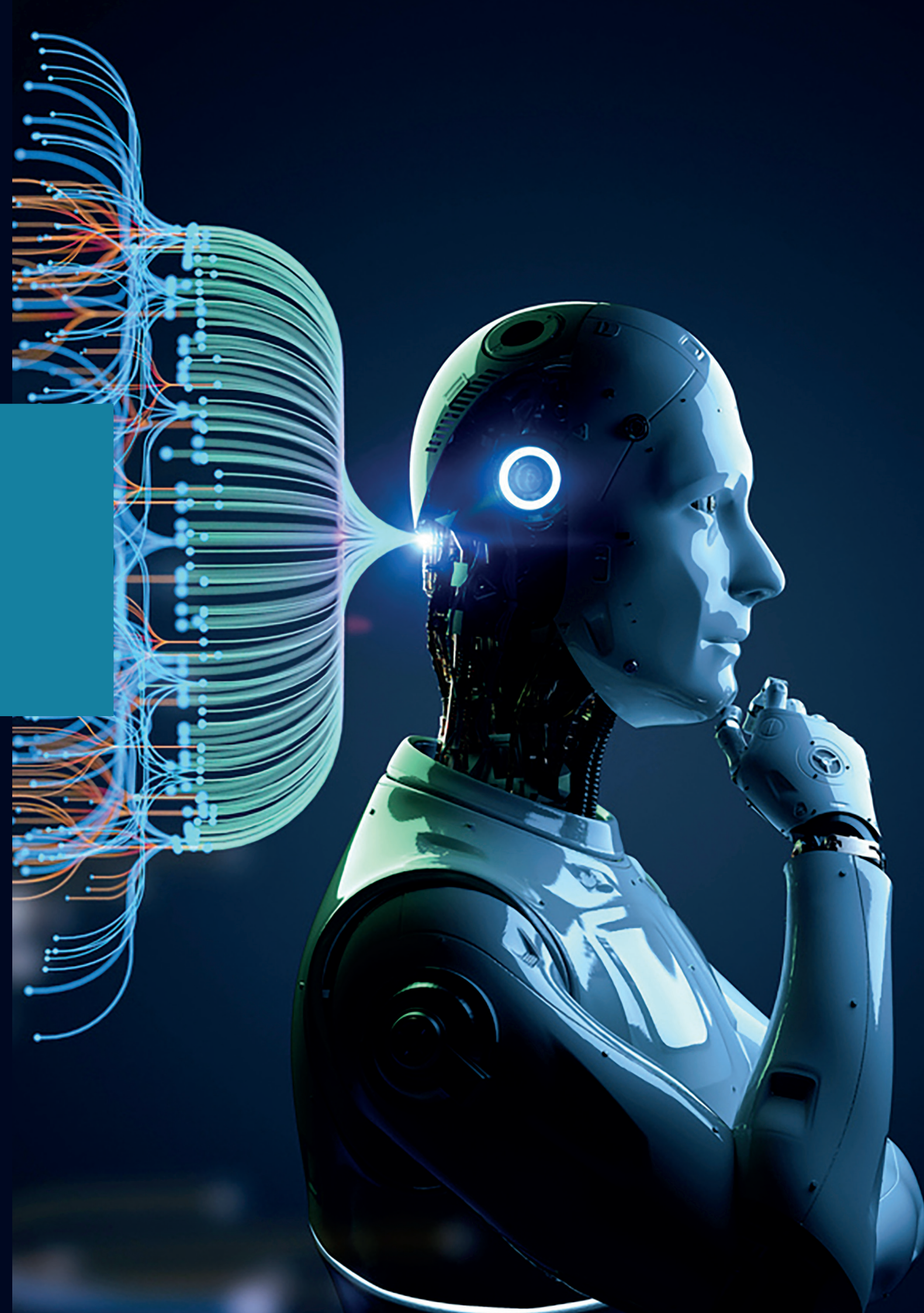
Testovanie rôznych typov modelov strojového učenia v prostredí HPC s dôrazom na jazykové a iné výpočtovo náročné modely je projekt riešený skupinou používateľov z **Kempeleňovho inštitútu inteligentných technológií**. „V posledných rokoch a najmä mesiacoch pozorujeme zrýchlené tempo vývoja nových, stále dokonalejších a tiež komplexnejších modelov strojového učenia. Dominantnými oblasťami sú pritom spracovanie prirodzeného jazyka, v ktorom zaznamenal nebývalý úspech jazykový model ChatGPT (resp. modely GPT-3.5 a GPT4), a počítačové videnie s generatívnymi modelmi ako DALL-E, Stable Diffusion či Midjourney. V rámci tohto testovacieho projektu chceme zvýšiť vlastné kompetencie v práci s extrémne komplexnými a výpočtovo náročnými modelmi strojového učenia vrátane v súčasnosti najväčších generatívnych jazykových modelov. Tieto by sme chceli následne za-

komponovať do vlastného výskumu a existujúcich aj nových výskumných projektov. Chceme sa tiež skúmať vlastnosti súčasných komplexných modelov. Za týmto účelom je potrebné natrénovať a následne vykonať inferenciu s veľkým množstvom dát.”

Devana otvára nové perspektívy pre slovenskú vedeckú komunitu a inovátorov.

Devana otvára nové perspektívy pre slovenskú vedeckú komunitu a inovátorov. Veríme, že prispeje ku konkurencieschopnosti slovenského akademického výskumu a že bude slúžiť aj malým a stredným podnikom a verejnej správe v snahe vyvíjať a používať pokročilejšie digitálne riešenia. Kvalitné projekty určite jasne ukážu opodstatnenie ďalšieho rozvoja HPC na Slovensku a jeho uplatnenie v najrôznejších oblastiach a odboroch.

Ak ste slovenský výskumník alebo inovátor, neváhajte využiť príležitosť, ktorú Devana poskytuje. Získajte prístup, realizujte svoje projekty a zapojte sa do vznikajúcej HPC komunity na Slovensku.



KVANTOVÉ TECHNOLÓGIE REALITOU NAPRIEČ EURÓPOU

V júni 2023 podpísal spoločný európsky podnik pre vysoko výkonné počítanie – EuroHPC JU – dohody so šiestimi inštitúciami alebo konzorciami naprieč Európou o hostovaní a prevádzkovaní kvantových počítačov. Šesť nových kvantových počítačov bude integrovaných s existujúcimi superpočítačmi v Česku, Francúzsku, Nemecku, Taliansku, Poľsku a Španielsku. Výber týchto hostiteľských subjektov, ktoré budú prevádzkovať systémy v mene spoločného podniku EuroHPC, bol vykonaný s cieľom zabezpečiť rozmanitosť v kvantových technológiách a architektúrach, čo Európe umožní byť v popredí tejto stále novej oblasti a poskytne európskym používateľom prístup k rôznorodým a komplexným kvantovým technológiám. Kvantové počítače budú spolufinancované z rozpočtu spoločného podniku EuroHPC JU pochádzajúceho z programu Digitálna Európa (DEP) a z príspevkov príslušných štátov. Spoločný podnik bude spolufinancovať až 50 % celkových nákladov na kvantové počítače s plánovanou celkovou investíciou viac ako 100 miliónov EUR.

Konzorcium EuroQCS-Poľsko bude hostiť jeden z kvantových systémov v **Superpoči-**

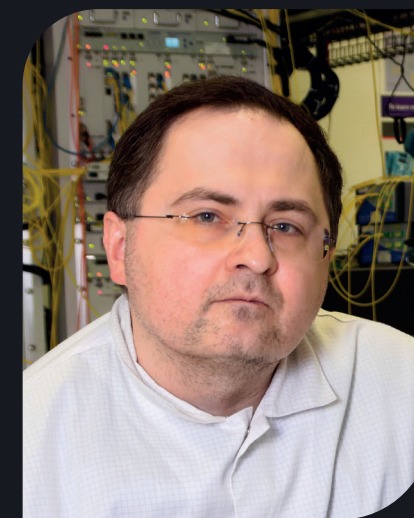
tačovom a sieťovom centre v Poznani (PSNC), kde bude integrovaný k existujúcej HPC infraštruktúre. PSNC bude viesť toto konzorcium, ktoré pozostáva z dvoch ďalších partnerov z Poľska – Centra pre teoretickú fyziku Poľskej akadémie vied a Creotech Instruments S.A. a jedného partnera z Lotyšska – Lotyšskej univerzity. Konzorcium EuroQCS-Poľsko má za cieľ vyvinúť kvantový počítač založený na technológii uväznených iónov. **Piotrovi Rydlichowskemu**, koordinátorovi projektov kvantových technológií v PSNC, sme položili niekoľko otázok o integrácii kvantového počítača v ich dátovom centre a jeho potenciáli pre vedeckú komunitu.

V kvantových počítačových technológiách existuje určitá rôznorodosť. Na akej technológii bude založený váš kvantový počítač a prečo?

Konzorcium EuroQCS-Poľsko, kde je PSNC lídrom a bude hostiteľom systému, má za cieľ vyvinúť kvantový počítač založený na technológii uväznených iónov. Táto technológia je už vyspelá a samotné uväznenie iónov je dobre známe a implementované v mnohých ďalších technológiách, ako sú napríklad atómové hodiny. Veľmi zaujímavou vlastnosťou tohto druhu kvantovej výpočtovej technológie je schopnosť implementovať flexibilnú topológiu qubitového prepojenia. Topológia nie je vopred určená, dá sa meniť a prispôbovať konkrétnemu prípadu použitia.

Bude kvantový systém integrovaný s existujúcou (HPC) infraštruktúrou? Ak áno, je výhoda mať ich na rovnakom mieste?

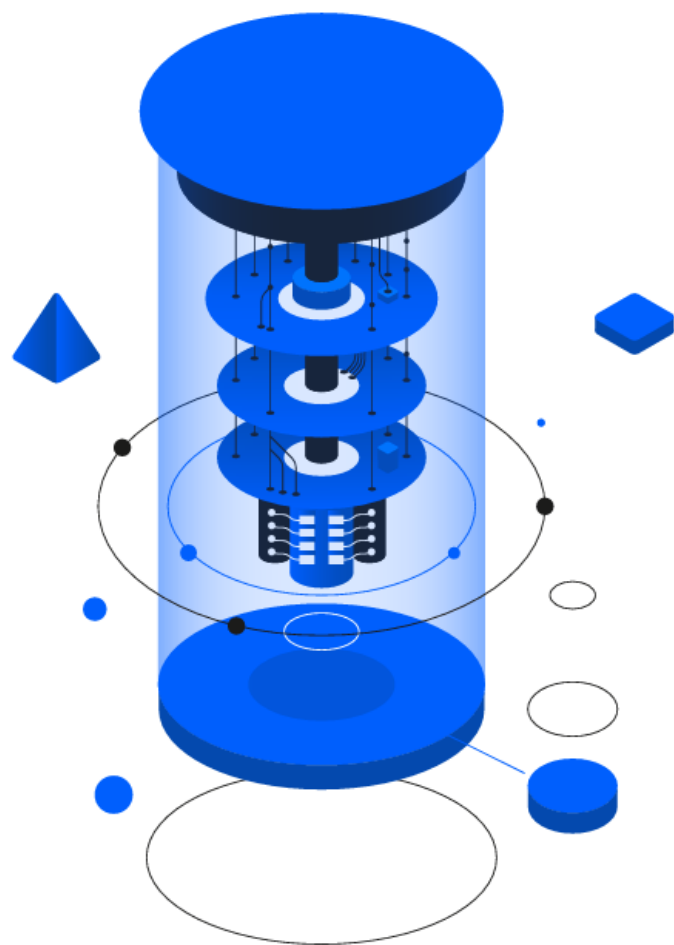
Infraštruktúra EuroQCS-Poľsko bude integrovaná s existujúcou HPC infraštruktúrou PSNC na dvoch rovinách. Prvou je údržba a prístup tak, aby sa umožnil jednoduchý a efektívny prístup ku kvantovému počítaču pomocou existujúcich EuroHPC nástrojov a infraštruktúry. Druhá rovina sa týka samotných algoritmov. Vďaka tejto integrácii bude možné využívať hybridné klasicko-quantové výpočty a scenáre pre výskumné úlohy. Je to obzvlášť zaujímavá a rýchlo sa rozvíjajúca oblasť. Kvantové počítače môžu byť potenciálne vysoko efektívne pri riešení špecifických problémov a môžu teda dopĺňať existujúce služby HPC infraštruktúry. Výhody tejto úzkej HPC a QC integrácie na rovnakom mieste teda sú – efektívnosť a možnosť viacvrstvového a fyzického prístupu, ktorý nemožno



**Piotr Rydlichowski
Ph.D. pôsobí
ako koordinátor
projektov
kvantových
technológií
v Super-
počítačovom
a sieťovom centre
v Poznani.**

OBRÁZOK 1

Všeobecné usporiadanie supravodivého kvantového počítača.



dosiahnuť použitím distribuovaného prístupu. Umožňuje tiež efektívne využitie a prístup k ďalším zdrojom požadovaným QC a HPC infraštruktúrou.

Aké sú najväčšie výzvy kvantového počítania v súčasnosti, ktoré zatiaľ bránia použitiu na riešenie reálnych problémov?

Existujúce kvantové výpočtové technológie sa vyvíjajú rýchlym tempom a neustále sa objavujú nové nápady na fyzickú implementáciu qubitov. Stále sme v období raného vývoja a skúmania rôznych technológií. Nastal však čas na testovanie a overenie viacerých prístupov, čo je jeden z dôvodov, prečo bude mať EuroQCS vo svojej infraštruktúre rôzne kvantové výpočtové technológie – supravodivé qubity, iónové pasce, optické qubity atď. Všetky tieto technológie majú výhody aj nevýhody, ktoré si vyžadujú ďalší výskum. Avšak najväčšie výzvy, ktoré v súčasnosti môžeme identifikovať

pre kvantové stroje, ktoré obmedzujú ich praktické využitie, sú počet qubitov, hĺbka, resp. zložitosť obvodov a chyby pri čítaní qubitov. Počet qubitov priamo ovplyvňuje, aké veľké problémy môže v danom momente kvantový počítač načítať a analyzovať. Hĺbka, resp. zložitosť obvodov a chyby pri čítaní qubitov spolu úzko súvisia. Kvantové počítače operujú s pravdepodobnosťou daného výsledku a proces čítania stavu qubitov vnáša chyby, ktoré sa následne propagujú naprieč obvodom a obmedzujú jeho použiteľnú hĺbku a zložitosť. Jednou z kľúčových oblastí výskumu v súčasnosti a budúcnosti sú techniky korekcie chýb, resp. ich zmiernenia, ktoré zlepšia kvalitu obvodov a ich praktické aplikácie.

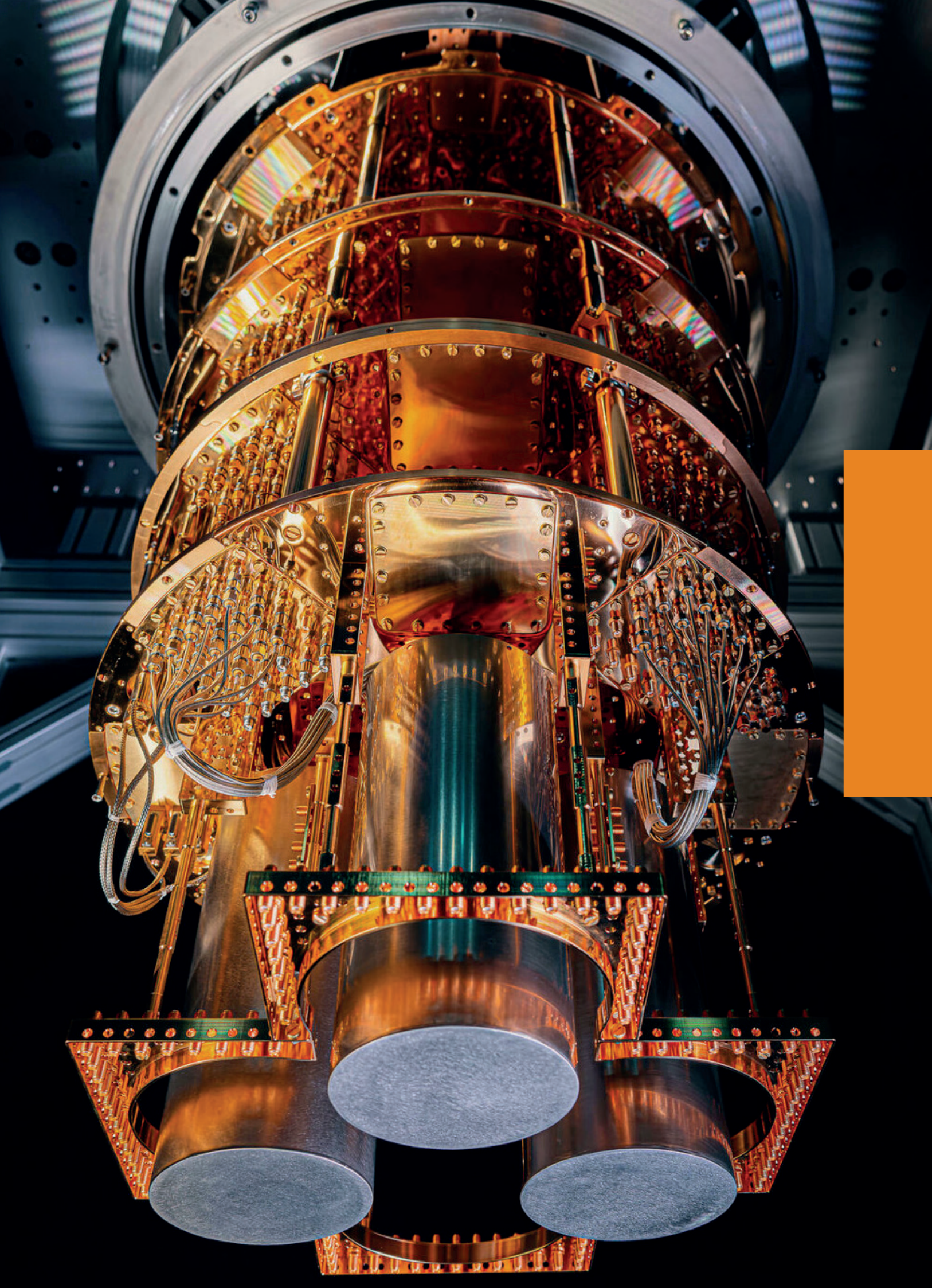
Na aké aplikácie sa konkrétne plánujete zamerať, keď bude počítač funkčný?

PSNC sa zaujíma o množstvo aplikácií QC, ktoré zahŕňajú samotné kvantové algoritmy, hybridné QC-klasické algoritmy a kvantové simulácie. Vzhľadom na blízku príslušnosť PSNC k Ústavu bioorganickej chémie Poľskej akadémie vied sú kvantové simulácie v chémii a medicíne mimoriadne zaujímavé. Za zmienku tiež stoja potenciálne aplikácie kvantového strojového učenia na analýzu lekárskeho snímok. Aplikácie kvantových simulácií majú špecifickú vlastnosť, že v mnohých oblastiach nie je potrebný veľký počet qubitov, nakoľko hlavnou myšlienkou je štúdium kvantového správania konkrétnych prvkov. Existuje taktiež široká oblasť rôznych prípadov využitia kvantovej optimalizácie. Osobitný záujem je aj o integráciu s kvantovými komunikačnými scenármi.

Sú už dostupné potrebné kvantové algoritmy na riešenie týchto problémov, alebo si to bude vyžadovať ďalší výskum?

Algoritmy pre vyššie uvedené simulácie, aplikácie a scenáre čiastočne existujú, keďže oblasť je v súčasnosti cieľom intenzívneho výskumu. Príkladmi sú VQE (Variational Quantum Eigensolver) alebo QAOA (Algoritmus kvantovej približnej optimalizácie), ktoré už boli použité v mnohých štúdiách a výskumných scenároch. V niektorých oblastiach, najmä v oblasti kvantových simulácií, je však potrebný ďalší výskum. Existujúce algoritmy je tiež potrebné neustále prispôbovať novým hardvérovým implementáciám. Je tu široký priestor pre potenciálne nové algoritmy, ako aj pre nové aplikácie.

Existujúce kvantové výpočtové technológie sa vyvíjajú rýchlym tempom a neustále sa objavujú nové nápady na fyzickú implementáciu qubitov.



Sú/budú kvantové počítače vhodné aj na spracovanie veľkého množstva dát?

Infraštruktúru kvantových výpočtov je možné efektívne využiť aj pri veľkých problémoch s analýzou veľkých dát, ale vyžaduje si efektívne klasické-quantové rozhranie a algoritmy. V súčasnosti je hranica veľkosti riešiteľných problémov určená počtom qubitov dostupných v systéme.

Mnohé univerzity a školy zavádzajú kurzy kvantovej mechaniky, ktoré pomáhajú lepšie pochopiť kvantové efekty a princípy v kvantových výpočtoch a komunikácii.

Aké sú potrebné „prerekvizity“ na to, aby vedci mohli začať používať kvantové počítanie?

V súčasnosti je vstupný prah zapojenia do kvantového počítania alebo kvantovej komunikácie pomerne vysoký, pretože prípady použitia a implementácie vyžadujú dobrú znalosť infraštruktúry kvantových výpočtov aj na fyzickej úrovni. Je to ako programovanie v asembleri. Vyžaduje sa aj znalosť a pochopenie kvantovej mechaniky v mnohých oblastiach. To je jeden z dôvodov, prečo mnohé univerzity a školy zavádzajú kurzy kvantovej mechaniky, ktoré pomáhajú lepšie pochopiť kvantové efekty a princípy v kvantových výpočtoch a komunikácii. Po vyvinutí programovacích rozhraní vyššej úrovne môžeme očakávať, že práca s infraštruktúrou kvantových počítačov bude jednoduchšia.

02

APLIKÁCIE v praxi

hpc focus

Detekcia anomálií v časových radoch:

prevencia gamblingu pomocou hlbokého učenia

BIBIÁNA LAJČINOVÁ

MARIÁN GALL

MICHAL PITOŇÁK

Prevencia gamblingu u hráčov online kasín je výzvou, so zjavne pozitívnym dopadom nielen na bežný život hráčov, ale aj na prevádzkovateľov kasín, ktorých úmyslom je sprostredkovať zodpovedné hranie. Na dosiahnutie týchto cieľov sme použili metódy hlbokého učenia „bez učiteľa“ (z angl. „unsupervised learning“), ktoré dokážu identifikovať hráčov vykazujúcich známky problémového hráčstva, s využitím dostupných dát vo forme časových radov. Prezентujeme porovnanie nami navrhutej architektúry autoenkódera založenej na transformeroch s rekurentnými a konvolučnými autoenkódermi, s dôrazom na výhody

tejto architektúry v detekcii anomálií. Keďže klinická diagnóza hráčov nebola v dostupných dátach k dispozícii, výsledky našej štúdie vyhodnocujeme analyzovaním „skóre anomálie“ získaného z autoenkódera (AE) a niekoľkých pomocných ukazovateľov, ktoré sú v literatúre často spomínané ako symptómy problémového hráčstva.

Patologické hranie hier je definované ako problémové správanie, kedy osoba opakovane staví objekt určitej hodnoty (najčastejšie peniaze) za účelom výhry, ale s neurčitým výsledkom [1], [2]. Bolo tiež odhalených mnoho podobností medzi problémovým gamblingom a závislosťami na omamných látkach [3]. S prístupnosťou internetu sa zvýšil aj výskyt patologického hráčstva. Toto správanie má často negatívny dopad nielen

na život dotknutých jednotlivcov, ale aj ich rodiny. Práve preto je včasná detekcia známok patologického hráčstva kľúčová nielen pre zachovanie duševného zdravia, ale aj finančnej situácie ovplyvnených osôb. Táto práca vznikla ako spolupráca Národného kompetenčného centra pre vysokovýkonné počítačanie, spoločnosti DOXXbet s.r.o. (športové tipovanie a online kasíno) a spoločnosti Codium s.r.o. (vývoj softvérovej platformy športové tipovanie a iGaming-u pre DOXXbet, s.r.o.), s cieľom zlepšenia služieb zákazníkom a prevencie patologického hráčstva. Tento „proof of concept“ projekt je základom pre ďalší vývoj nástrojov, ktoré pomôžu poskytovateľovi zmierniť dopad negatívnych následkov problémového hráčstva na životy hráčov, aj za cenu zníženia príjmov, čo je v súlade s aktuálnymi európskymi trendmi v risk manažmente online hazardných hier.

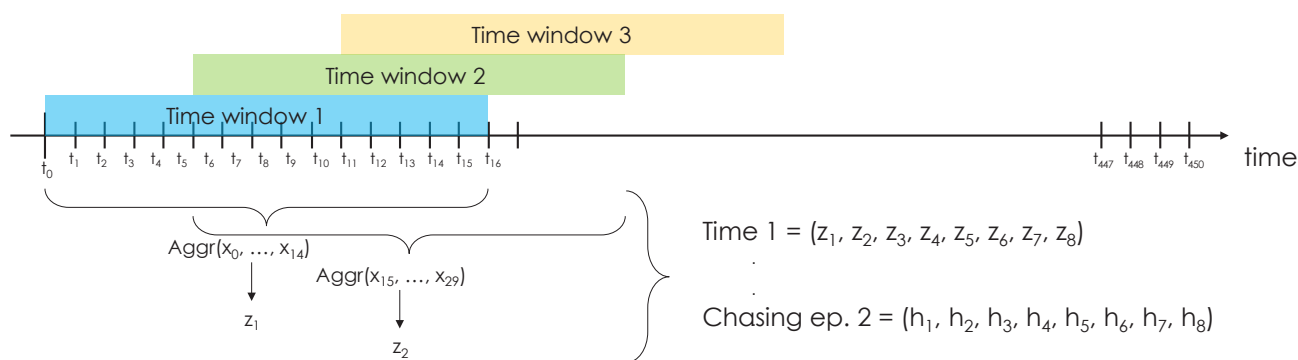
V našej práci sme použili prístup učenia „bez učiteľa“ s využitím neurónovej AE siete založenej na transformeroch za účelom detekcie anomálií. Predpokladáme, že dáta patologických hráčov, ktorých by (štatisticky) medzi všetkými hráčmi malo byť medzi 0.5 až 5%, vykazujú anomálie, nie nutne naopak. Dátová sada, ktorú používame, neobsahuje klinickú diagnózu hráčov a spomedzi pomocných ukazovateľov sa v dátach nachádzajú len niektoré – žiadosti o zvýšenie limitu vkladov, doháňanie strát intenzívnejším hraním (ďalej budeme tento indikátor označovať „epizódy naháňania straty“), používanie viacerých platobných metód, časté výbery malých finančných obnosov a ďalšie, ktoré budú spomenuté neskôr. Nakoľko nie všetci hráči, ktorí preukážu anomálne správanie musia byť patologickými hráčmi, boli pomocné ukazovatele použité v kombinácii so „skóre anomálie“, získaného ako výstup z AE.

Patologické hranie hier je definované ako problémové správanie, kedy osoba opakovane staví objekt určitej hodnoty (najčastejšie peniaze) za účelom výhry, ale s neurčitým výsledkom.



OBRÁZOK 1

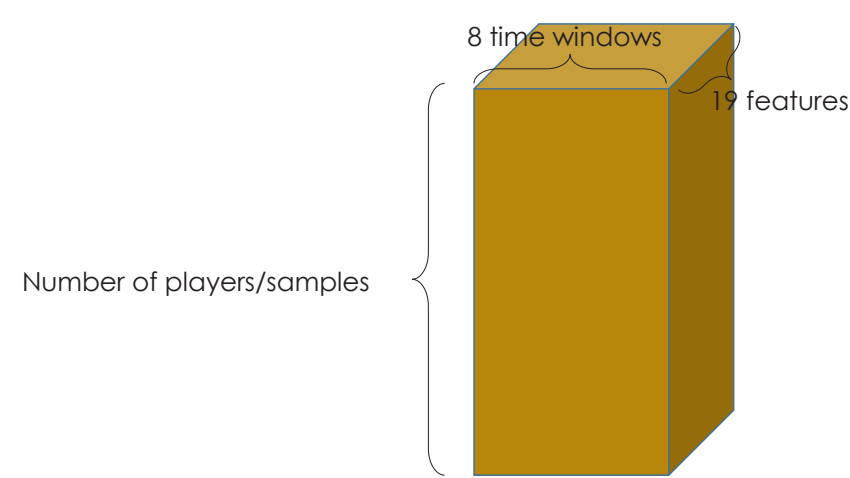
Vizualizácia agregácie denných záznamov do časových okien a do finálnej formy prvkov deskriptora. t_1, \dots, t_{450} predstavujú časové záznamy pre denné dáta x_1, \dots, x_{450} . Denné záznamy z časového okna sú agregované do jednej hodnoty z_i pre všetky $i \in \{1, \dots, 8\}$.



Architektúra modelu neurónovej siete

Autoenkóder je metóda hlbokého učenia „bez učiteľa“ vhodná na detekciu anomálií v ČR. Myšlienka použitia tohto typu neurónovej siete na detekciu anomálií je založená na rekonštrukčnej schopnosti modelu. AE sa naučí rekonštruovať dáta v tréningovej sade a keďže tréningová sada by ideálne mala obsahovať len „normálne“ pozorovania, model sa na-

Dáta použité v tejto štúdii sú sekvenciami pozorovaní zbieraných v čase, monitorujúce viaceré aspekty hráčskeho správania ako frekvencia a časy hier, frekvencia a výška peňažných vkladov, platobné metódy použité pri peňažných vkladoch, informácie o výške stávk, výhier, strát, výberoch a taktiež početnosť žiadostí o zmenu limitu pre výšku vkladov. Z týchto dát bolo extrahovaných 19 prvkov deskriptora vo forme časových radov (ČR). Každý prvok deskriptora pozostáva z viacerých hodnôt, ktoré sú chronologicky usporiadané. Tieto príznaky sú pre zrozumiteľnosť klasifikované do troch kategórií – „čas“, „peniaze“ a „zúfalstvo“, inšpirované autormi Seth a kol. [4]. Každý prvok deskriptora je sekvenciou N hodnôt, pričom každá hodnota predstavuje jedno z N po sebe idúcich časových okien. Každá takáto hodnota bola získaná agregáciou denných dát v príslušnom časovom okne, pričom dĺžka časového okna bola v rozmedzí od 15 dní až po 3 mesiace. Časové okno bolo v niektorých prípadoch pohyblivé, v iných nie. Pre každé pozorovanie teda potrebujeme dáta z N časových okien a zvolená hodnota N po sérii experimentov bola 8. Celý proces extrakcie premenných je zobrazený na Obrázku 1, finálny tvar dát na Obrázku 2.



OBRÁZOK 2

Finálny tvar dát vstupujúcich do modelu. Každé pozorovanie pozostáva z devätnástich prvkov deskriptora a každý prvok pozostáva z ôsmich časových okien.

učí správne rekonštruovať len takéto pozorovania. Preto keď je vstupné pozorovanie anomálne, natrénovaný AE model nedokáže tento vstup zrekonštruovať dostatočne správne, čo má za následok vysokú rekonštrukčnú chybu. Táto rekonštrukčná chyba môže byť použitá ako skóre anomálie daného pozorovania, pričom vyššie skóre znamená väčšiu pravdepodobnosť, že pozorovanie sa vymyká všeobecnému trendu.

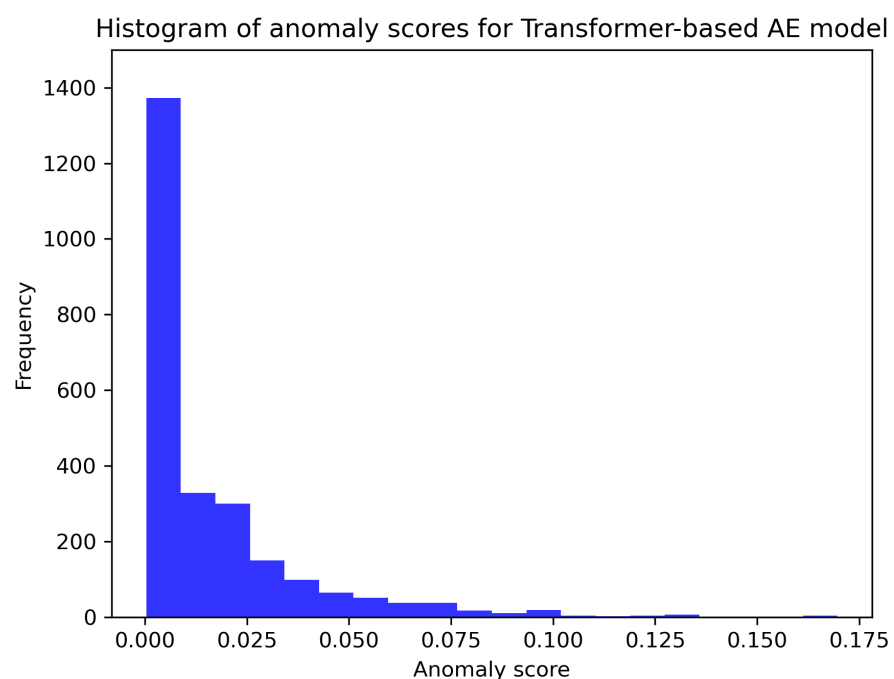
V štúdii sme natrénovali AE model na báze transformerov, kde enkóder aj dekóder obsahujú vrstvu nazývanú „Multi Head Attention“ so štyrmi „hlavami“ a 32-dimenzionálnymi vektormi kľúčov a hodnôt. Za touto vrstvou nasleduje klasická neurónová sieť s tzv. „dropout“ vrstvami a reziduálnymi spojeniami. Celý AE model má niečo málo viac než 100k trénovateľných parametrov.

Rekonštrukčná chyba a predikčná schopnosť

Na vyhodnotenie stability modelov sme uskutočnili 3-násobnú krížovú validáciu. Výsledná priemerná strata na tréningovej množine je 0.010, na validačnej 0.012 a na testovacej 0.015. Strata na testovacej množine je vyššia než tá na tréningovej alebo validačnej množine, čo je spôsobené tým, že 211 anomálnych pozorovaní bolo presunutých do testovacej množiny. Bez presunu týchto pozorovaní by bola strata na testovacej množine 0.012. Výkon modelu je prezentovaný na Obrázku 3 vo forme histogramu hodnoty stratovej funkcie. Histogram má „ťažký pravý chvost“, čo je očakávané pre dátové sady obsahujúce anomálie.

OBRÁZOK 3

Histogram rekonštrukčnej chyby AE modelu na báze transformera pre testovaciu množinu. Na osi x je hodnota skóre anomálie a na osi y je frekvencia príslušnej hodnoty.



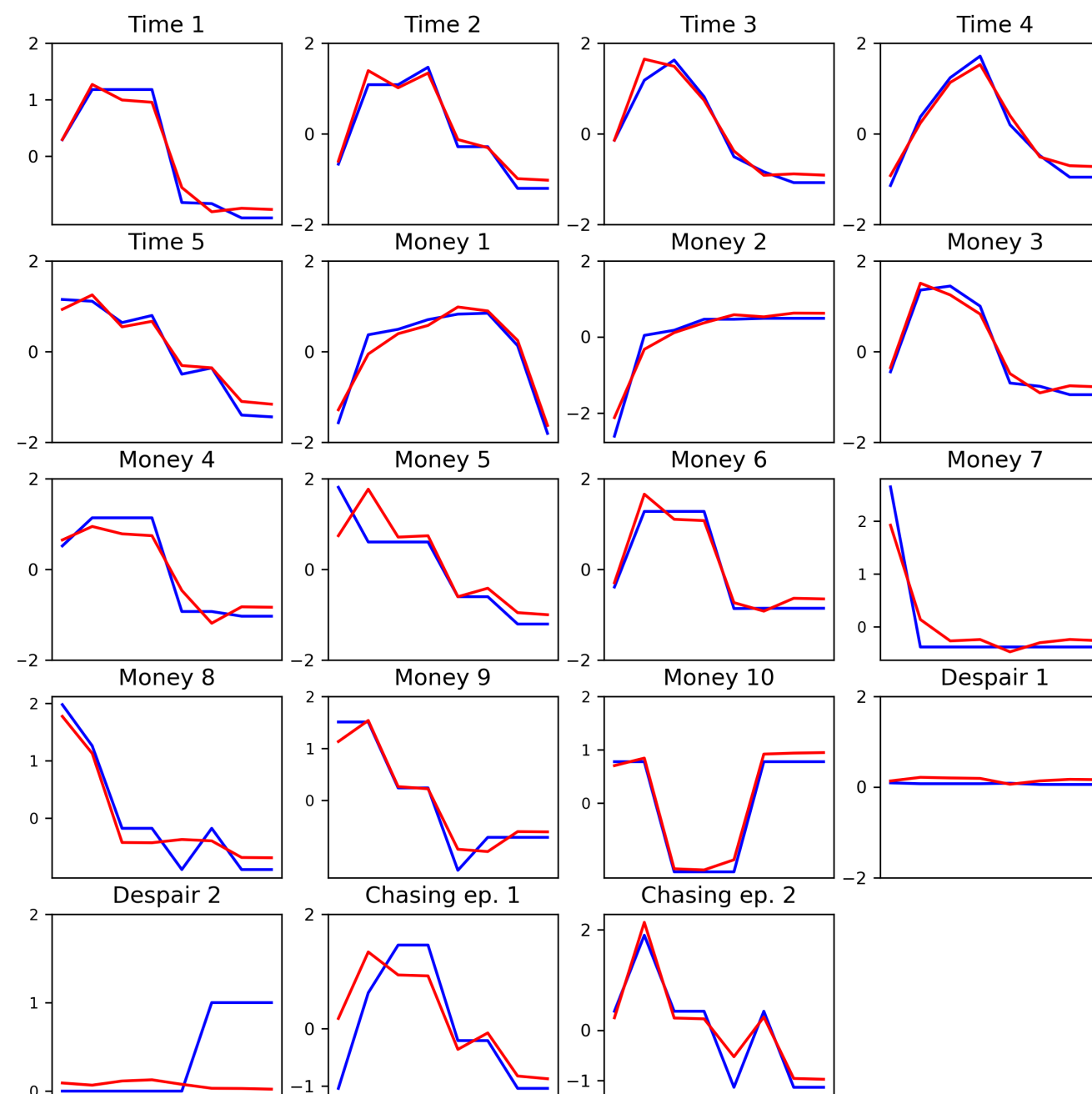
Na demonštráciu kvality rekonštrukcie ČR sú na Obrázku 4 znázornené pôvodné (modrá čiara) a predikované (červená čiara) hodnoty pre náhodne vybrané anomálne pozorovanie jedného hráča. Hodnota skóre anomálie pre príslušný model je uvedená v nadpise grafu.



OBRÁZOK 4

Predikčná schopnosť: modrá čiara predstavuje vstupné dáta, červená rekonštrukciu získanú pomocou AE modelu na báze transformera. Číslo uvedené v nadpise grafu predstavuje skóre anomálie pre danú vzorku dát.

Transformer-based model reconstruction [0.094]



Tento „proof of concept“ projekt je základom pre ďalší vývoj nástrojov, ktoré pomôžu poskytovateľovi zmierniť dopad negatívnych následkov patologického hráčstva na životy hráčov.

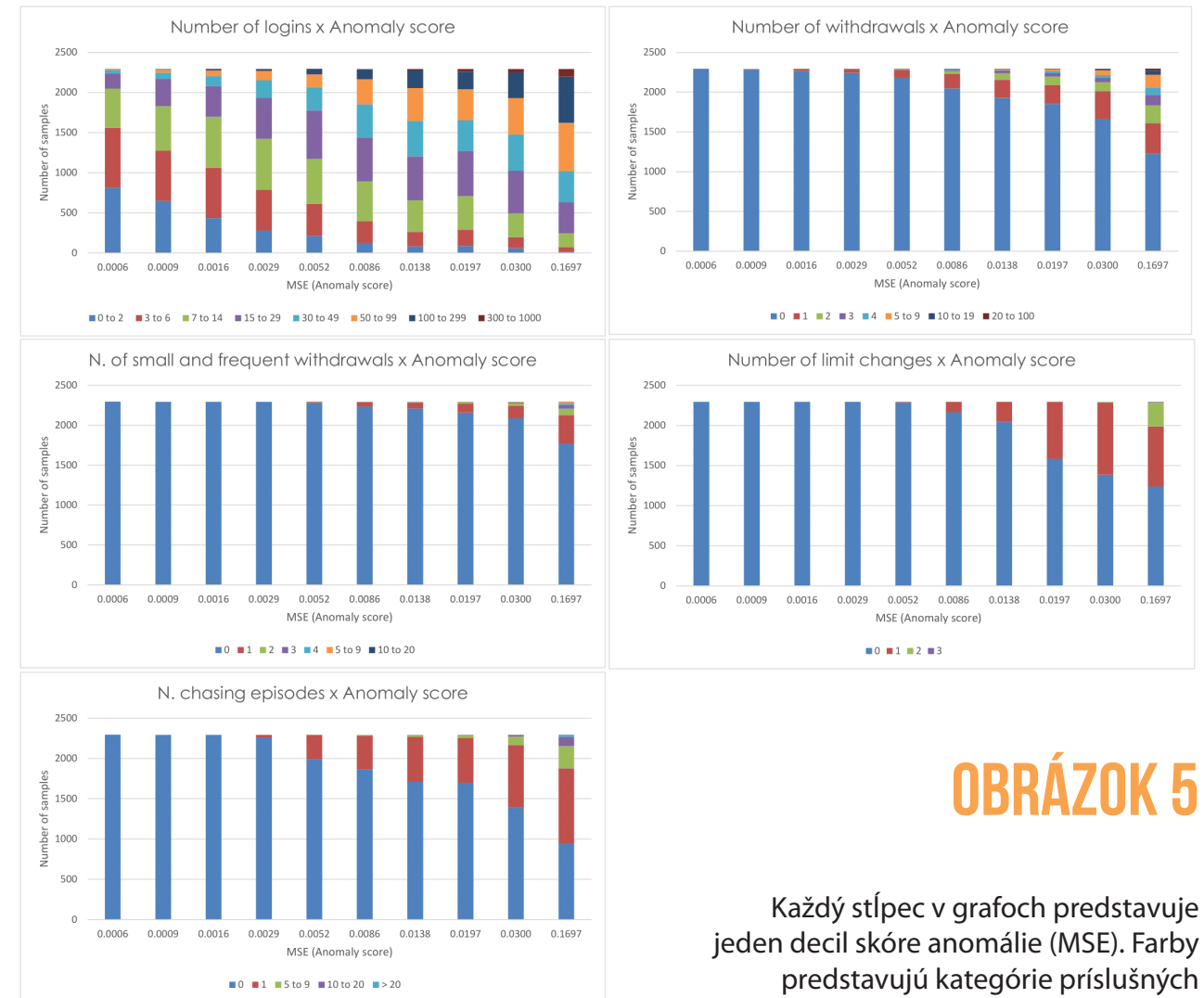
Výsledky

Nakolko nebola klinická diagnóza súčasťou dát, ktorými sme disponovali, môžeme sa pri identifikácii hráčov s potenciálne problémovým hráčstvom spoliehať len na pomocné ukazovatele. K tejto úlohe sme pristúpili tak, že síce detegujeme anomálie v dátach, ale sme si vedomí toho, že nie všetky anomálie musia indikovať problém s gamblingom. Preto budeme korelovať výsledky AE modelu s týmito pomocnými ukazovateľmi:

- Priemerný počet prihlásení v časovom okne.
- Priemerný počet výberov v časovom okne.
- Priemerný počet malých a častých výberov v časovom okne.
- Priemerný počet žiadostí o zmenu limitu výšky vkladov v časovom okne.
- Celkový počet epizód naháňania straty v období N časových okien.

Na Obrázku 5 je zobrazená korelácia skóre anomálie s hore uvedenými pomocnými ukazovateľmi. Každý z grafov obsahuje desať stĺpcov, pričom každý stĺpec reprezentuje jeden decil pozorovaní (t. j. každý stĺpec zobrazuje 10% pozorovaní zoradených podľa hodnoty skóre anomálie). Farby stĺpcov predstavujú hodnotu, resp. kategóriu príslušného pomocného ukazovateľa.

Na každom grafe je možné pozorovať zreteľné vzorce v správaní hráčov – hráči s vysokou hodnotou skóre anomálie majú tendenciu mať tiež vysoké hodnoty všetkých skúmaných pomocných ukazovateľov. Vysoká frekvencia prihlásení do online kasína je úmerná vysokému skóre anomálie, pričom viac než polovica hráčov v poslednom decile rekonštrukčnej chyby má priemerný počet prihlásení v časovom okne väčší než 50. Niečo podobné pozorujeme aj pre priemerný počet výberov v časovom okne. Hráči s nízkou hodnotou skóre nemajú žiadny, alebo majú veľmi malý priemerný počet výberov a zároveň viac než štvrtina hráčov v poslednom decile skóre má v priemere až dva a viac výberov v časovom okne. Ďalším skúmaným pomocným ukazovateľom je počet malých a častých výberov. Väčšina hráčov, ktorí majú v histórii aspoň jednu takúto udalosť, sú v 10% hráčov s naj-



OBRÁZOK 5

Každý stĺpec v grafoch predstavuje jeden decil skóre anomálie (MSE). Farby predstavujú kategórie príslušných pomocných ukazovateľov s hodnotami kategórií špecifikovanými v legende.

vyšším MSE. Pri analýze ďalšieho ukazovateľa, konkrétne počtu žiadostí o zmenu limitu vkladu, pozorujeme už menej výrazný trend. Je evidentné, že hráči v prvých piatich deciloch nemajú vo všeobecnosti žiadne zmeny limitu výberov (až na pár výnimiek), čím však skóre anomálie rastie, tým sa frekvencia zmeny limitu výberov u hráčov zvyšuje. Posledným pomocným ukazovateľom zobrazeným na grafoch je počet epizód naháňania straty. Opäť môžeme pozorovať zvyšujúcu sa frekvenciu týchto udalostí úmernú skóre anomálie. Viac než polovica hráčov v posled-

nom decile má aspoň jednu takúto epizódu v časovom okne.

Ak vykonáme superpozíciu týchto grafov za účelom zistenia, aký podiel hráčov spĺňa viacero pomocných ukazovateľov, dospejeme k nasledovnému pozorovaniu: 98.6% hráčov v posledných piatich percentiloch skóre anomálie spĺňa aspoň jeden pomocný ukazovateľ a 77.3% spĺňa aspoň tri ukazovatele. Analýzou správania hráčov v posledných dvoch percentiloch skóre anomálie zistujeme, že takmer 90% z nich spĺňa aspoň tri ukazova-



tele. Hranice, ktoré boli použité na výpočet týchto podielov sú: ≥ 1 epizóda naháňania straty, ≥ 1 žiadosť o zmenu limitu, ≥ 1 malý a častý výber, ≥ 31 prihlásení a ≥ 1.25 výberu v priemere počas jedného časového okna.

V práci sme úspešne aplikovali model autoenkódera (AE) založený na transformeroch na problém detekcie anomálií v dátovej sade hráčov online kasína. Cieľom bolo detegovať hráčov s patologickým hráčstvom metódami „bez učiteľa“. Zo vstupných dát bolo odvodených 19 prvkov deskriptora vo forme časových radov, ktoré odrážajú správanie hráčov v kontexte „času“, „peňazí“ a „zúfalstva“. Porovnali sme detekčnú schopnosť tejto architektúry s ďalšími tromi AE architektúrami založenými na LSTM a konvolučných vrstvách, pričom sme zistili, že architektúra modelu založená na transformeroch dosiahla najlepšie výsledky zo všetkých skúmaných modelov v zmysle najlepšej rekonštrukčnej schopnosti. Výsledky tohto modelu tiež vykazujú vysokú koreláciu s pomocnými ukazovateľmi ako počet prihlásení hráča, počet výberov, počet epizód naháňania straty a ďalšími, ktoré sú často spomínané v literatúre vo vzťahu k patologickému hraniu.

Tento súlad „skóre anomálie“, ktoré odráža pravdepodobnosť, že dané pozorovanie sa vymyká priemeru, s pomocnými ukazovateľmi nám dovoľuje porozumieť modelu a jeho efektívnosti v detekcii hráčov s potenciálnym patologickým hráčstvom. Aj keď tieto pomocné ukazovatele boli použité ako prediktory v modeli, navrhujeme ich používať spolu s rekonštrukčnou chybou pri detekcii potenciálne problémových hráčov, aby sa redukovala falošná pozitivita predikcií, nakoľko nie všetky anomálie musia byť spojené s patologickým hráčstvom.

Včasná detekcia patologického hráčstva je kľúčová nielen pre zachovanie duševného zdravia, ale aj finančnej situácie ovplyvnených osôb.

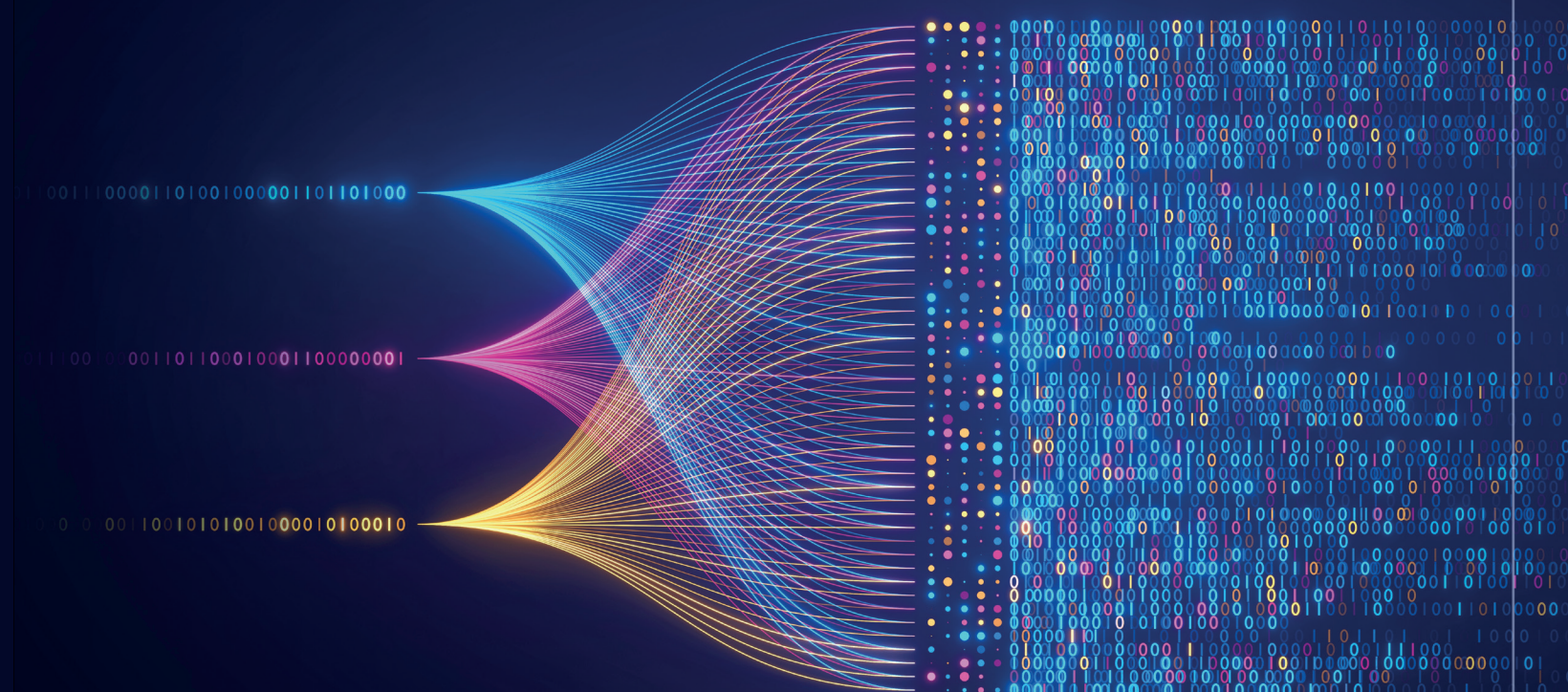
Plná verzia článku je dostupná na [webe](#) Národného kompetenčného centra.

LITERATÚRA

- [1] Alex Blaszczynski and Lia Nower. *A Pathways Model of Problem and Pathological Gambling*. In: *Addiction* (Abingdon, England) 97 (June 2002), pp. 487–99. doi: 10.1046/j.1360-0443.2002.00015.x.
- [2] National Research Council. *Pathological Gambling: A Critical Review*. Washington, DC: The National Academies Press, 1999. isbn: 978-0-309-06571-9. doi: 10.17226/6329. url: <https://nap.nationalacademies.org/catalog/6329/pathological-gambling-a-critical-review>.
- [3] Luke Clark et al. *Pathological Choice: The Neuroscience of Gambling and Gambling Addiction*. In: *Journal of Neuroscience* 33.45 (2013), pp. 17617–17623. issn: 0270-6474. doi: 0.1523/JNEUROSCI.3231-13.2013. url: <https://www.jneurosci.org/content/33/45/17617>.
- [4] Deepanshi Seth et al. *A Deep Learning Framework for Ensuring Responsible Play in Skill-based Cash Gaming*. In: 2020 19th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA) (2020), pp. 454–459.



Meranie štrukturálnych parametrov kapsúl použitím techník umelej inteligencie (AI) a strojového učenia (ML)



Cieľom spolupráce medzi **Národným kompetenčným centrom pre HPC** (NCC pre HPC) a **Ústavom polymérov (ÚP) SAV** bol návrh a implementácia pilotného softvérového riešenia pre automatické spracovanie obrazu frakcií polymérnych mikrokapsúl. Tieto mikrokapsuly slúžia ako obal pre pankreatické ostrovčeky tvoriace perspektívne liečivo na ochorenie diabetes mellitus (t.j. cukrovky 1. typu). Mikrokapsuly pozostávajú z pankreatických ostrovčiek enkapsulovaných do polopriepustnej polymérnej membrány, ktorá bola vyvinutá na Ústave polymérov SAV.

Automatizované riešenie je pre ÚP SAV mimoriadne dôležité z hľadiska časovej úspory a zjednodušenia vyhodnocovania početných výstupov z meraní, ako aj minimalizácie chyby, ktorá sa môže objaviť pri manuálnom spracovaní. Obrázky z optického mikroskopu pri 4-násobnom zväčšení typicky obsahujú jednu alebo niekoľko mikrokapsúl a sú vstupom do tréningu AI/ML modelov. Obrázky z optického mikrosko-

pu pri 2,5-násobnom zväčšení obsahujú viac mikrokapsúl, zvyčajne tri až sedem. V takomto prípade je nutné v prvom kroku identifikovať jednotlivé mikrokapsuly. V procese inferencie sa z príslušného obrázku vytvorí tzv. binárna maska, z ktorej sa následne extrahujú informácie o štrukturálnych parametroch, akými sú predovšetkým vnútorný a vonkajší priemer kapsuly a hrúbka jej membrány.

Obrazový materiál je spracovaný v dvoch krokoch. Prvým krokom je lokalizácia nedefektných kapsúl a ich následné vystrihnutie, druhým je séria operácií vedúcich k samotnému určeniu štrukturálnych parametrov.

Detekcia kapsúl

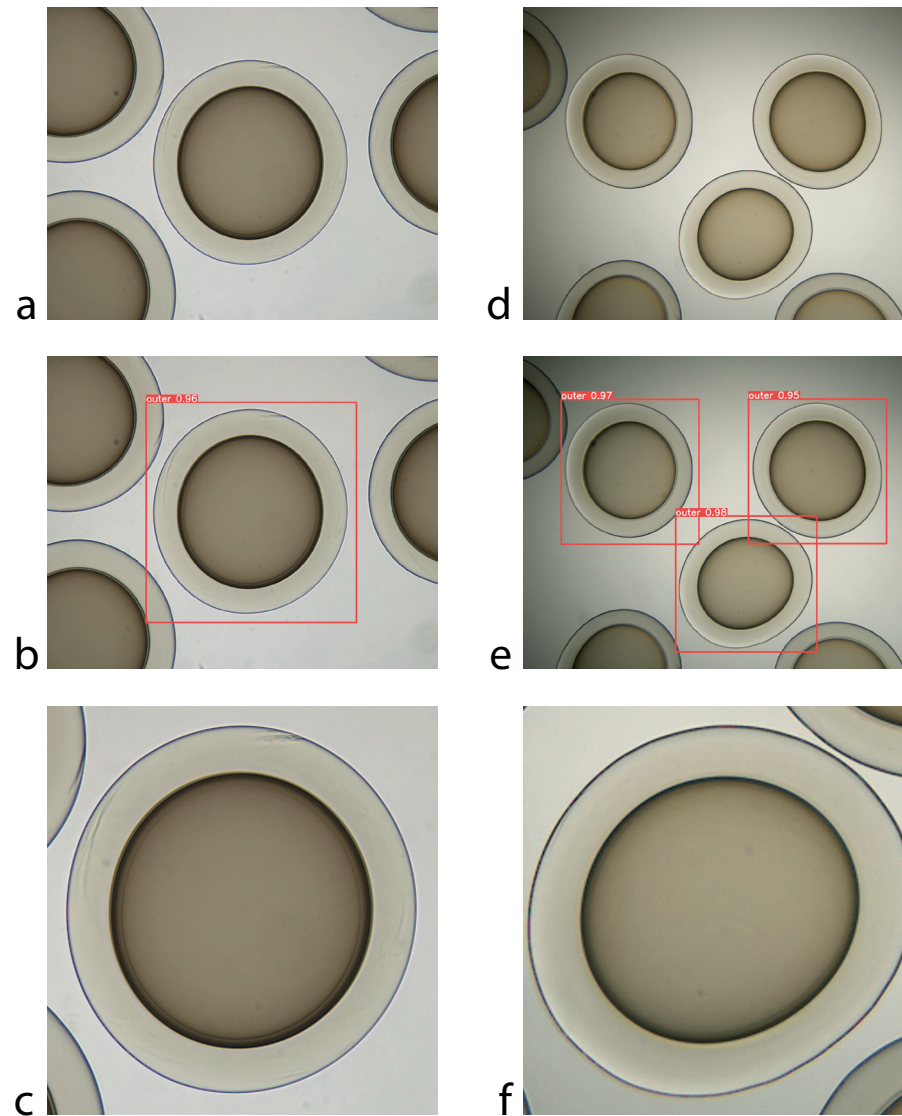
Na detekciu kapsúl bol použitý model YOLOv5 [1] s predtrénovanými váhami z databázy COCO128 [2]. Tréningové dáta pozostávali z 96 snímok, ktoré boli manuálne anotované pomocou nástroja Labellmg [3]. Tréningová jednotka pozostávala z 300 epoch, snímky boli rozdelené do sád po 16 a ich veľkosť bola nastavená na 640 pixelov. Výpočtový čas jednej tréningovej jednotky na grafickej karte NVIDIA GeForce GTX 1650 bol približne 3,5 hodiny.

Detekcia pomocou natrénovaného YOLOv5 modelu je prezentovaná na Obrázku 1. Spoľahlivosť natrénovaného modelu, overená na 12 snímkach, bola 96%, pričom priepustnosť na rovnakej grafickej karte bola približne 40 snímok za sekundu.

Mikrokapsuly slúžia ako obal pre pankreatické ostrovčeky tvoriace perspektívne liečivo na ochorenie diabetes mellitus.

OBRÁZOK 1

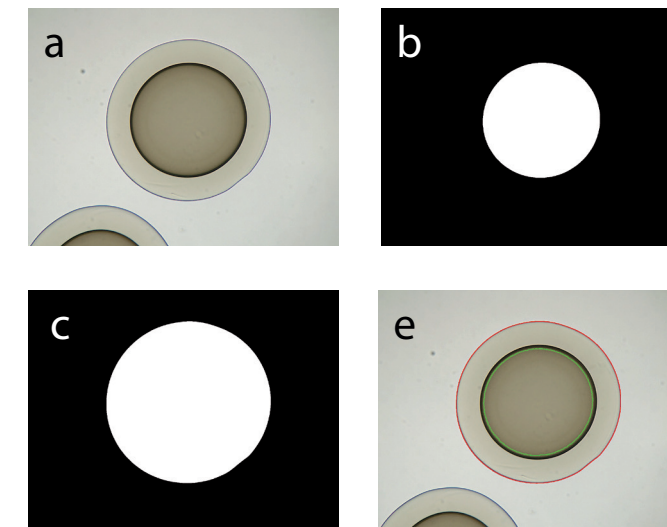
(a) vstupný obraz z optickej mikroskopie (b) detegovaná kapsula (c) výrez detegovanej kapsuly pri 4-násobnom zväčšení, (d) vstupný obraz z optickej mikroskopie (e) detegovaná kapsula (f) výrez detegovanej kapsuly pri 2,5-násobnom zväčšení.



Meranie štrukturálnych parametrov kapsúl pomocou techník AI/ML

Binárne masky pre vnútorné a vonkajšie časti kapsúl boli získané individuálne, ako výstup z hlbokoj neurónovej siete architektúry U-Net [4], ktorá bola vyvinutá na spracovanie obrazu v biomedicínskych aplikáciách. Na tréning príslušných váh bolo použitých 140 obrázkov s korešpondujúcimi maskami pre 4-násobné zväčšenie optického mikroskopu a rovnako 140 obrázkov s korešpondujúcimi maskami aj pre 2,5-násobné zväčšenie. Tréningový proces pozostával z 200 epoch (veľkosť sady 16), pričom 10% z tréningových dát bolo použitých na validáciu. Presnosť na testovacej sade, ktorá pozostávala zo 120 obrázkov, presahovala 96%. Tréningový proces trval 1,5

až 2 hodiny a na trénovanie bol využitý HPC systém s uzlami typu IBM Power 7. Tento proces bolo nutné niekoľkokrát opakovať. Výstupné binárne masky boli následne postprocesované operáciami „fill_holes“ [5] a „watershed“ [6], na získanie čo najhladších oválnych masiek. Následne bola na masky fitovaná elipsa s využitím knižnice „scikit-image measure“ [7], ktorej hlavná a vedľajšia os sú základom pre samotný výpočet štrukturálnych parametrov. Postupnosť týchto krokov je prezentovaná na Obrázku 2.

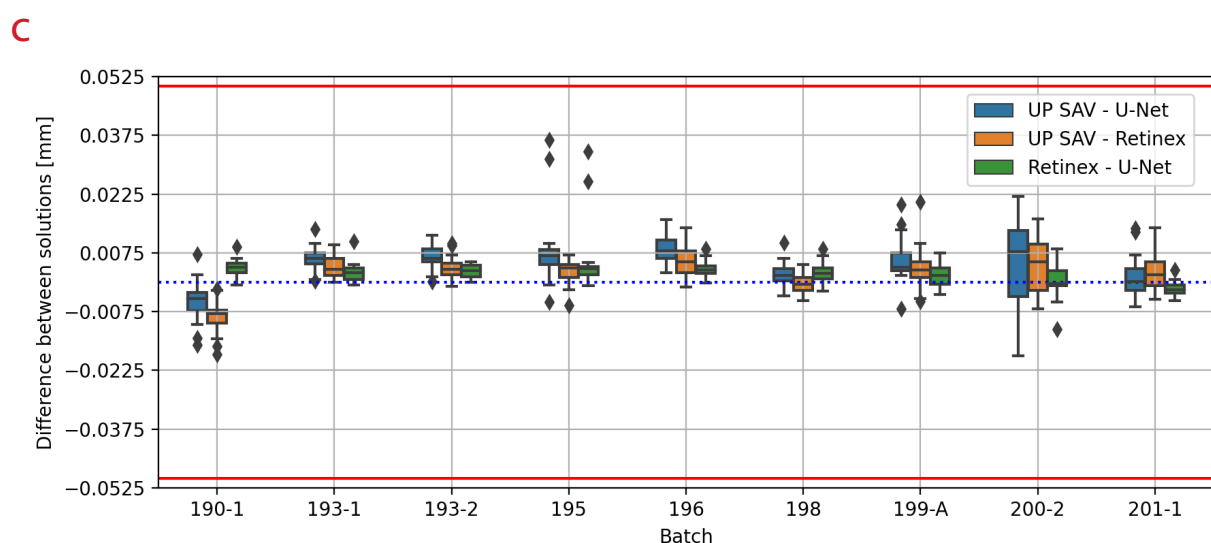
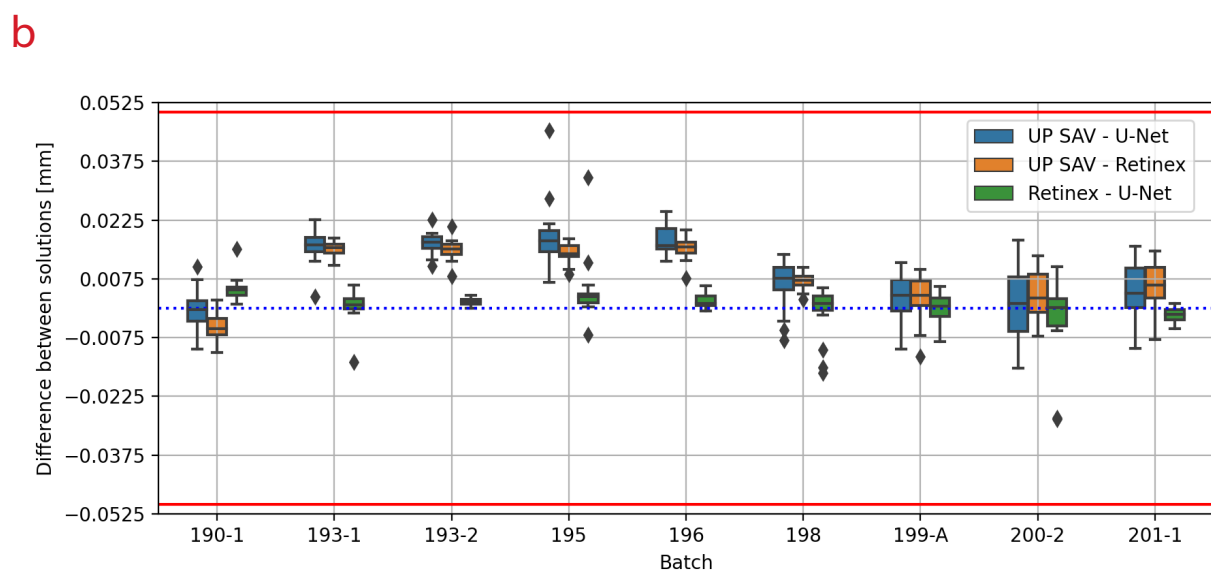
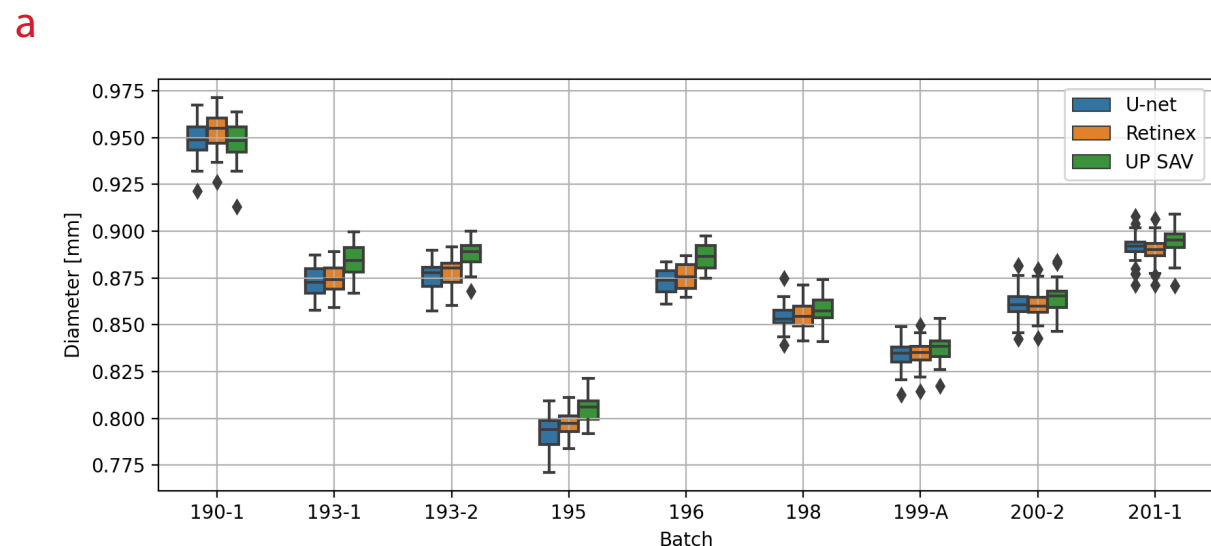


OBRÁZOK 2

(a) vstupný obraz (b) vnútorná binárna maska (c) vonkajšia binárna maska (d) výstupný obraz s fitovanými elipsami elipsy na základe binárnych masiek.

Štrukturálne parametre získané predikciou AI/ML modelu (značený ďalej ako „U-Net“) boli porovnané s hodnotami, ktorými disponovali pracovníci ÚP SAV a boli získané „manuálnym meraním“ v snímkach. Ako ďalší, nezávislý zdroj referenčných dát bol použitý prístup označovaný ďalej ako „Retinex“, ktorý navrhol a implementoval RNDr. Andrej Lúčny, PhD. z Katedry aplikovanej informatiky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave. Tento prístup nevyužíva neurónové siete, ale vytvára kandidátov na binárne masky agregáciou úsekov s nízkou krivosťou, získaných pomocou „retinex“ filtra [8] tak, aby vytvorili útvar s minimálnou štandardnou odchýlkou krivosti. Tento prístup je dobrou referenciou, nakoľko nevyžaduje trénovanie a je vysoko presný, avšak na rozdiel od modelu U-net nie je plne automatizovaný, obzvlášť pre vnútornú membránu kapsuly.

Obrázok 3 sumarizuje porovnanie všetkých spomenutých riešení pre rôzne sady („batches“) z experimentov pre obrázky získané pri 4-násobnom zväčšení.



OBRÁZOK 3

(a) rozmer kapsúl vypočítaný pre prístupy U-net a Retinex ako priemer hlavnej a vedľajšej osi elipsy (b) rozdiel medzi hlavnou osou elipsy pre vonkajší priemer kapsúl (c) rozdiel medzi vedľajšou osou elipsy pre vonkajší priemer kapsúl. V obrázkoch (b) a (c) je červenou čiarou zobrazená akceptovateľná ÚP SAV. Obrázky z optického mikroskopu boli získané pri 4-násobnom zväčšení.

Zo získaných výsledkov je možné skonštatovať, že až na 4 snímky (1,5%) v sade 194 pre vedľajšiu os elipsy, sú všetky parametre v medziach akceptovateľnej presnosti, ktorá bola definovaná ÚP SAV. Z Obrázku 3(a) pozorujeme systematicky lepšiu vzájomnú zhodu medzi výsledkami získanými prístupmi U-net a Retinex, čo môže byť spôsobené buď aproximáciou tvaru kapsuly elipsou, ktorá sa v „manuálnom vyhodnotení“ ÚP SAV neaplikovala, alebo iným, systematickým rozdielom pri vyhodnocovaní, a/alebo chybou v „manuálnom vyhodnotení“. Kvalita U-net modelu môže byť do budúcnosti výrazne zlepšená, hlavne rozšírením tréningovej sady ako aj aplikovaním ďalšieho pre- a postprocesingu. Zhoda medzi „manuálnym vyhodnotením“ a modelmi U-net / Retinex môže byť zlepšená harmonizáciou spôsobu vyhodnocovania štrukturálnych parametrov kapsúl z binárnych masiek.

AI/ML model bude nasadený v predprodukčnej fáze ako cloudové riešenie na HPC systémoch CSČ SAV. Inferencia a kontinuálny tréning s pribúdajúcimi snímkami nebude vyžadovať investíciu do vysokovýkonných výpočtových prostriedkov samotným ÚP SAV. Produkčná fáza, ktorá presahuje rámec pilotného riešenia, uvažuje s integráciou tohto prístupu do desktopovej aplikácie.

ZDROJE

- [1] <https://github.com/ultralytics/yolov5>
- [2] <https://www.kaggle.com/ultralytics/coco128>
- [3] <https://github.com/heartexlabs/labelimg>
- [4] <https://lmb.informatik.uni-freiburg.de/people/ronneber/u-net/>
- [5] https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.ndimage.binary_fill_holes.html
- [6] https://scikit-image.org/docs/stable/auto_examples/segmentation/plot_watershed.html
- [7] <https://scikit-image.org/docs/stable/api/skimage.measure.html>
- [8] D.J. Jobson, Z. Rahman, G.A. Woodell, IEEE Transactions on Image Processing 6 (7) 965-976, 1997.

VÝSKUMNÁ SKUPINA POČÍTAČOVÉHO MODELOVANIA MATERIÁLOV na ATRI MTF STU v TRNAVE

NOVÉ OXIDY NIKLU, MEDI A PALÁDIA

Nadväzujúc na náš predchádzajúci príspevok **Predikcia nových anorganických zlúčenín** (HPC FOCUS 2022), ktorý bol venovaný počítačovému modelovaniu zlúčenín striebra s halogénovými prvkami (halidom striebra), v tomto príspevku sa zameriame na predstavenie nášho výskumu v oblasti nových oxidov niklu, medi a paládia.

Nikel, meď a paládium patria v Periodickej tabuľke prvkov medzi hlavné prechodné prvky, ktoré poznáme tiež pod označením chemické prvky d-bloku, keďže ich valenčné (resp. chemicky aktívne) elektróny sa nachádzajú v d orbitáloch. Táto skupina sa vyznačuje rôznorodosťou fyzikálnych a chemických vlastností, čoho dôsledkom je ich obrovský význam ako v základnom a v aplikovanom výskume tak aj v priemysle. Často však vystupujú vo forme zlúčenín s inými prvkami, pričom práve ich zlučovanie s inými prvkami najviac prispieva k rozmanitosti ich vlastností. Preto štúdium nových zlúčenín prechodných kovov patrí medzi primárne úlohy základného výskumu.

Najvýznamnejšie a najdlhšie skúmané zlúčeniny prechodných kovov sú ich oxidy, keďže kyslík patrí medzi najčastejšie sa vyskytujúci chemický prvok na zemi a prechodné kovy s ním v prírodných podmienkach ľahko reagujú či už v pôde,

vo vodnom prostredí alebo na vzduchu. Ide o bežný prírodný jav, ktorý dobre poznáme napríklad ako chemickú koróziu kovov, kedy pri styku kovu s kyslíkom vznikne stabilnejší oxid. Hoci korózia sa nám spája s degradáciou alebo znehodnocovaním materiálu, vo všeobecnosti tvorba oxidov prechodných kovov významne prispieva k rozšíreniu rozmanitosti ich vlastností a tým ich funkcionality. Oxidy prechodných kovov sú obzvlášť významné pre moderné technologické aplikácie, pretože hostujú nové vlastnosti ako vysokoteplotná supravodivosť, gigantická magnetorezistivita, a rôzne nové magnetické a elektrické vlastnosti, ktoré môžu byť dodatočne vzájomne spriahnuté. To robí z oxidov kandidátov na multifunkčné materiály, ktoré vykonávajú viacero funkcií súčasne bez minimálnej intervencie. Tvorba oxidov môže tiež viesť aj k vylepšeniu už existujúcich



atraktívnych vlastností prechodných kovov akými sú napríklad ich katalytické schopnosti a oxidačno-redukčné vlastnosti, významné z hľadiska vývoja nových energetických materiálov.

Z hľadiska veľkého potenciálu oxidov prechodných kovov, je obzvlášť významný fakt, že každý prechodný prvok má možnosť s kyslíkom tvoriť veľa zlúčenín, ktoré sa líšia zastúpením počtu atómov prechodného prvku a kyslíka. Dodatočne, každá zo zlúčenín môže existovať súčasne v rôznych typoch kryštálových štruktúr, ktoré sa líšia iným usporiadaním atómov a tým pádom iným setom vlastností, alebo ich modifikácií. Vynikajúcim príkladom je titán a jeho oxidy. Titán je výnimočne pevný a pritom ľahký kov s veľkou odolnosťou voči korózii vo vodnom prostredí, preto má široké využitie od kuchynského riadu, športových pomôcok, rôznych vystuží, konštrukčných elementov a povlakov od medicíny až po námorníctvo. Spolu s kyslíkom tvorí ponad 20 rôznych zlúčenín respektíve fáz (Ti_2O , TiO , TiO_2 , Ti_2O_3 ,...), pričom, každá z nich môže nadobúdať rôzne kryštálové štruktúry (len pre TiO_2 poznáme ponad 10 kryštálových štruktúr) s ktorými mu pribúda nespočetné množstvo ďalších vlastností a aplikácií. Napríklad najznámejšia forma TiO_2 , známa ako rutil, má vynikajúce vlastnosti ako pigment blokujúci UV žiarenie, ktorý sa vo veľkom využíva ako biele farbivo a UV filter v kozmetických výrobkoch. Viacero foriem TiO_2 je horúcimi kandidátmi pre fotovoltaické aplikácie. Iná skupina oxidov titanu so všeobecným vzorcom Ti_nO_{2n-1} ($n=2,3,\dots$) známa pod názvom Magnéliho fázy, pomenovaná podľa ich objaviteľa Arne Magnéliho, má veľký technologický potenciál vďaka vysokej odolnosti proti korózii v kyslých a zásaditých roztokoch, elektrickej vodivosti

Hoci korózia sa nám spája s degradáciou alebo znehodnocovaním materiálu, vo všeobecnosti tvorba oxidov prechodných kovov významne prispieva k rozšíreniu rozmanitosti ich vlastností a tým ich funkcionality.



Výskumnú skupinu Počítačového modelovania materiálov na MFT STU v Trnave založila Dr. hab. Mariana Derzsi (vľavo). Spolu s Dr. Kamilom Tokárom (vpravo) vedú mladý tím pozostávajúci zo študentov I. až III. stupňa a postdokov.



a elektrochemickej stability. Je evidentné, že tak veľká rozmanitosť Ti-O fáz dáva bohatý priestor na využitie ich technologického potenciálu.

Naším cieľom je dosiahnuť podobnú štruktúrnu rozmanitosť v oxidov niklu, medi a paládia, ktoré na rozdiel od titanu sú ďaleko menej preskúmané. Všetky tri kovy majú veľké priemyselné využitie predovšetkým v stavebníctve a automobilovom priemysle. Med' je známa svojou výnimočnou elektrickou vodivosťou (medené elektrické káble). Nikel ako kľúčový komponent šľachetnej ocele zlepšujúci jeho tvárnosť, zvrátnosť a ťažnosť, a odolnosť proti korózii pri vysokých teplotách. Paládium je kľúčovým kovom v katalyzátoroch pre automobily, kde premieňa toxické plyny z automobilov na menej škodlivé látky. Hoci, oxidy týchto kovov sú zná-

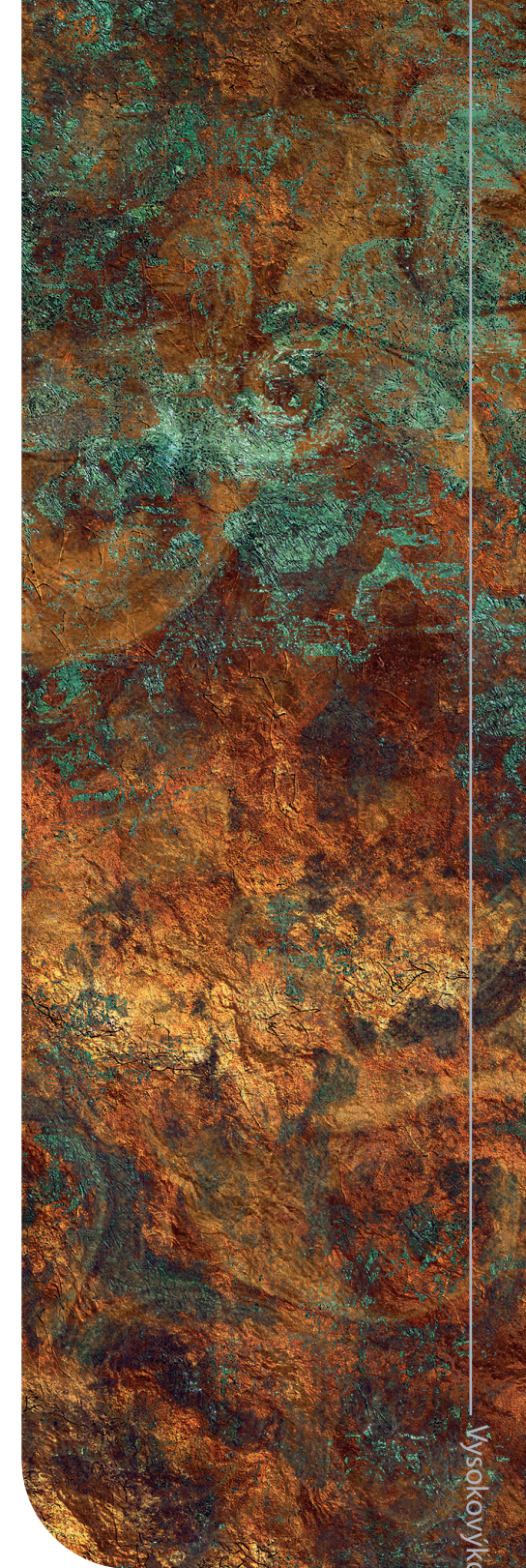
me, ich fázová rozmanitosť značne zaostáva za tou, ktorú poznáme napríklad pre titán, pričom doterajší výskum silne naznačuje výnimočnosť týchto oxidov relevantný hlavne pre elektronické aplikácie a energetiku.

V našom výskume sa preto v prvom rade zameriavame na štúdium fázovej a štruktúrnej rozmanitosti oxidov niklu, medi a paládia. Pomocou počítačových simulácií založených na kvantovomechanických výpočtoch a evolučných algoritmoch, študujeme možnosť tvorby širokého spektra fáz, navrhujeme ich kryštálové štruktúry, a predpovedáme vlastnosti, ktorými sa vyznačujú.

Dominantným nástrojom pri hľadaní nových materiálov je dnes počítačové modelovanie založené na kvantovomechanických výpočtoch. Kritickým

krokom, ktorý predchádza kvantovomechanickým výpočtom, je návrh modelu molekulovej štruktúry hľadanej zlúčeniny. Naším prvým zdrojom vstupných modelov sú databázy, ktoré uchovávajú informácie o všetkých známych typoch molekulových a kryštálových štruktúr. Predpoveď štruktúry novej zlúčeniny začína od selekcie známych typov štruktúr pre danú stechiometriu. Ak napríklad našou navrhovanou zlúčeninou je Cu_2O_3 , ktorá obsahuje dva chemické prvky Cu a O v pomere 2:3, tak z databázy vyselektujeme štruktúry pre všetky známe zlúčeniny obsahujúce len dva chemické prvky, nazvime ich A a B, v tom istom pomere 2:3. Vo vyselektovaných A_2B_3 štruktúrach následne nahradíme chemický prvok A medou a prvok B kyslíkom. Takto navrhnuté vstupné modely sú vystavené „testu správnosti“ v podobe kvantovomechanických výpočtov. Kvantová mechanika je nevyhnutná pre správny opis medziatómových interakcií, ktoré diktujú vzájomné usporiadanie atómov v štruktúre, pričom platí, že optimálne rozloženie je také, kedy všetky sily medzi atómami sú navzájom vyvážené a štruktúra nadobudne minimálnu energiu. Kvantovomechanické výpočty sú teda pri predikcii nových zlúčenín využívané na optimalizáciu navrhovaných modelov. Počas optimalizačného procesu dochádza k preskupovaniu atómov, až kým sa nedosiahne ich optimálne rozloženie. V ďalších výpočtoch sa preveruje stabilita optimalizovaných modelov v rôznych podmienkach, možné cesty ich syntézy a počítajú sa ich vlastnosti. Výsledkom všetkých týchto výpočtov je predpoveď existencie novej zlúčeniny, ktorá zahrňuje opis očakávanej štruktúry, kľúčových vlastností a podmienok stability.

Vyššie opísaný postup selekcie vstupných modelov nie vždy vedie k predpovedi najoptimálnejšej štruktúry, preto sa na tento účel čoraz častejšie využívajú sofistikovanejšie postupy napríklad v podobe evolučných algoritmov. Tieto algoritmy nevyužívajú štruktúrne databázy, ale generujú náhodne usporiadanie atómov, pričom zohľadňujú len nevyhnutný set pravidiel ako napríklad minimálne chemicky zmysluplné rozostupy medzi atómami. Takto generované modely následne tiež podliehajú kvantovomechanickej optimalizácii. Rozdiel je len v tom, že tu proces optimalizácie navrhnutých modelov nekončí ale začína. V ďalšom kroku sa vyselektujú modely s najnižšími energiami a tie sa ďalej použijú na tvorbu novej generácie modelov, ktoré opäť podliehajú optimalizácii. Celý proces sa niekoľkokrát opakuje, pričom sa generujú desiatky nových generácií a tým sa dramaticky zvyšujú šance na nájdenie optimálnej štruktúry. Spôsob tvorby nových generácií

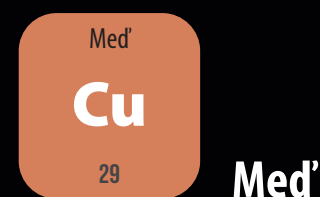




Rozsiahlemu štúdiu Cu-O systému sa venovala dr. Sankari Sampath, ktorá bola súčasťou našej výskumnej skupiny v rokoch 2019 až 2021.

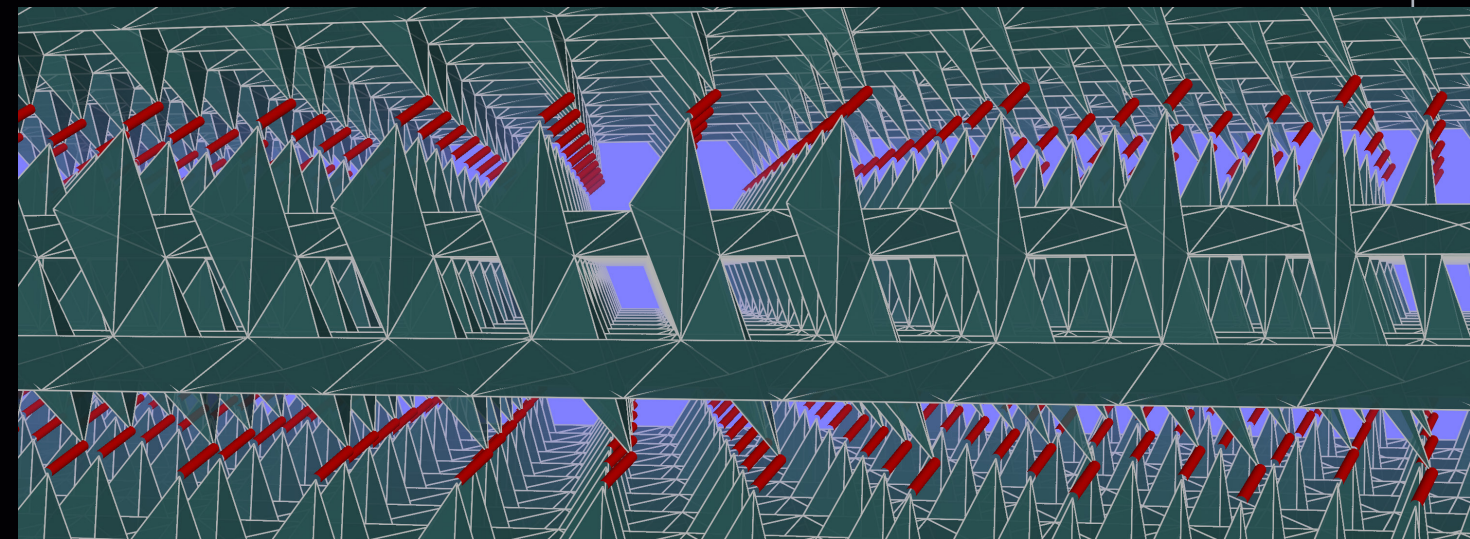
modelov je inšpirovaný procesmi z biologickej evolúcií ako rozmnožovanie (tvorba dcérskeho modelu z dvoch rodičovských modelov) alebo mutácia (vnášanie rôznych zmien do vyselektovaných modelov).

Nižšie uvádzame naše prvé zaujímavé výsledky, ktoré sme získali pri štúdiu nových oxidov niklu, medi a paládia pomocou vyššie predstavených teoretických postupov.



Binárne oxidy medi [Cu-O] sa tešia veľkej pozornosti širokej vedeckej komunity kvôli svojim elektronickým a optickým vlastnostiam, ktoré z nich robia slubných kandidátov pre fotovoltaiiku a elektroniku založenú na báze oxidov (*all-oxide electronics*). Sú to vynikajúce absorbéry svetla (elektromagnetického žiarenia v celom rozsahu viditeľnej oblasti), vykazujú vynikajúcu stabilitu, sú netoxické a jednoducho sa vyrábajú. Okrem toho vytvárajú rozsiahlu rodinu polovodičov a supravodičov a ako také patria k najviac študovaným oxidom prechodných kovov. Dodnes sú známe iba tri binárne fázy Cu_2O , $\text{Cu}^{\text{II}}\text{O}$ a $\text{Cu}^{\text{I}}\text{Cu}^{\text{II}}\text{O}_3$, aj keď vo vedeckej literatúre je veľa náznakov možnej tvorby rôznych iných stechiometrií.

Jeden zo zaujímavých výsledkov, ktorý sme získali pri štúdiu Cu-O systému, sa týka skupiny binárnych oxidov so všeobecným chemickým vzorcom M_2O_3 , ktoré sú známe pod názvom seskvioxidy. Seskvioxidy tvoria kovové aj nekovové prvky a najväčšiu skupinu predstavujú seskvioxidy prechodných prvkov. Spomedzi seskvioxidov prechodných prvkov 4. pe-



riódy jedine Cu_2O_3 nie je dodnes známy. Naše výsledky získané pomocou evolučných algoritmov nám pomohli odhaliť jeho chemickú aj štrukturálnu podobu (Obrázok 1). Zistili sme, že Cu_2O_3 obsahuje dva druhy kyslíkových aniónov, menovite bežný O^{2-} a superoxidový anión O_2^{2-} . Prítomnosť dvoch rôznych aniónov robí Cu_2O_3 výnimočným spomedzi všetkých známych seskvioxidov. Väčšina seskvioxidov obsahuje bežný O^{2-} anión. Výnimku tvoria seskvioxidy alkalických kovov, ktoré obsahujú peroxidový anión O_2^{2-} a superoxidový anión O_2^- . Prítomnosť peroxidového a superoxidového aniónu v seskvioxidoch alkalických kovov je ľahko pochopiteľná. Prítomnosť bežného kyslíkového aniónu vyžaduje prítomnosť katiónu s oxidačným stupňom 3+, aby bola zaručená neutralita zlúčeniny ($\text{M}^{3+}_2\text{O}_3$). Keďže alkalické kovy môžu v zlúčeninách nadobúdať len oxidačný stupeň 1+, jediný spôsob ako môžu s kyslíkom vytvoriť seskvioxid je, ak kyslíkové atómy v ňom vytvoria superoxidové a peroxidové anióny (e.g. $\text{Rb}_2\text{O}_3 = \text{Rb}^+_2(\text{O}^-)_2\text{O}_2^{2-}$). Vracajúc sa späť k neznámemu Cu_2O_3 , prítomnosť superoxidového aniónu v jeho štruktúre naznačuje nemožnosť stabilizácie Cu^{3+} v seskvioxide medi. Med' sa s touto vlastnosťou vyníma spomedzi ostatné prechodné prvky, ktoré všetky vystupujú v seskvioxidoch ako katióny s oxidačným číslom 3+.

Rozsiahlemu štúdiu Cu-O systému sa venovala dr. Sankari Sampath, ktorá bola súčasťou našej výskumnej skupiny v rokoch 2019 až 2021. Dr. Sampath získala PhD. z materiálových vied na Ruhr-Universität Bochum v Nemecku a DFT modelovaniu Cu-O systému sa venovala vďaka Schéme Návraty Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR a postdoktorandskému grantu Slovenskej technickej univerzity v Bratislave.

OBRÁZOK 1

Nová štruktúra Cu_2O_3 predpovedaná pomocou evolučných algoritmov. Na obrázku sú zvýraznené $[\text{CuO}_4]$ jednotky (tmavozelené polyédre) poprepávané kyslíkovými O-O mostíkmi.





Ing. Radovan Bujdák je doktorandom MTF STU a v rámci svojho doktorandského štúdia sa venuje DFT+EA modelovaniu širokého spektra doposiaľ neznámych binárnych fáz oxidov niklu.

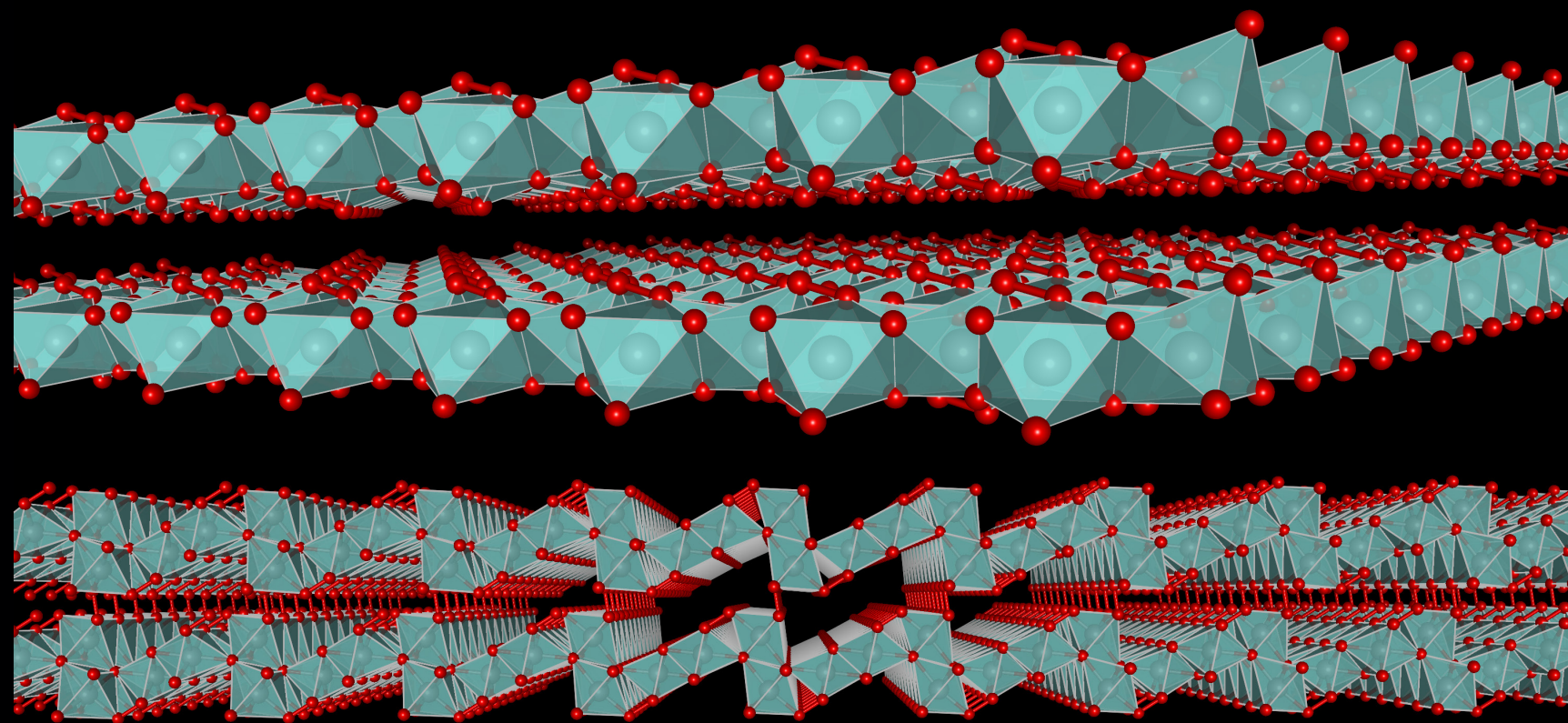
Nikel

Ni

28

Nikel

Binárny systém niklu s kyslíkom Ni-O obsahuje len jednu dobre charakterizovanú fázu, oxid nikelnatý NiO. Často sa za známu fázu považuje aj seskvioxid Ni_2O_3 , ktorý je známy aj ako čierny nikel (black nickel). Napriek tomu, že mu bol daný už aj familiárny názov, je zarážajúce, že je slabo charakterizovaný a nepoznáme ani len jeho kryštálovú štruktúru. Vzhľadom na fakt, že čierny nikel sa v súčasnosti čoraz viac používa ako zložka mnohých funkčných materiálov vďaka jeho deklarovanej fotokatalytickej aktivite, Ni_2O_3 je prvá fáza s ktorou sme začali naše štúdium Ni-O systému. Podobne ako v prípade vyššie spomenutého seskvioxidu medi Cu_2O_3 , aj Ni_2O_3 vykazuje neobyčajné správanie medzi známymi seskvioxidov. Naše kvantovomechanické výpočty naznačujú prítomnosť dvoch rôznych katiónov niklu. O ich prítomnosti svedčia rozdielne dĺžky chemických väzieb, ktoré tvoria s kyslíkovými aniónmi ako aj rôzne hodnoty magnetických momentov. To je neobyčajné, pretože prevažná väčšina seskvioxidov obsahuje len jeden druh katiónu. Ni_2O_3 tak imituje správanie ternálnych oxidov, ktoré obsahujú dva rôzne kovové prvky (napríklad Fe a Ti) a ktoré sú známe aj ako ilmenity ($FeTiO_3$). Toto zistenie môže mať veľký význam pre pochopenie deklarovanej fotokatalytickej aktivity Ni_2O_3 , nakoľko prítomnosť dvoch rôznych Ni katiónov môže byť kľúčovým faktorom.



Ako druhý v poradí nás zaujal oxid nikeličný Ni_2O_5 . Oxid nikelnatý predstavuje úplne neznámu a nepreskúmanú fázu. Našu pozornosť upútal preto, že pentoxidy prechodných prvkov sú známe a navyše vykazujú bohatý polymorfizmus s rôznou úrovňou štruktúrnej zložitosti. Oxidačné číslo 5+, ktoré je charakteristické pre pentoxidy, je exotické v prípade niklu. Na druhej strane elektrónová konfigurácia d_5 , ktorá prislúcha katiónu Ni^{5+} , kedy každý d orbitál je obsadený jedným elektrónom, patrí medzi najstabilnejšie. Naše prvé výsledky naznačujú, že v bežných podmienkach má Ni^{5+} tendenciu sa redukovať v Ni_2O_5 a dochádza k tvorbe kyslíkových mostíkov. To znamená, že môžeme očakávať vznik peroxidu alebo superoxidu v podobe atraktívnych vrstevnatých štruktúr (Obrázok 2).

Štúdiu Ni_2O_3 sa v rámci svojej diplomovej práce a následne v rámci vedecko-výskumnej činnosti venovala rokoch 2019 – 2021 Ing. Michaela Gašpárková. Na prácu Ing. Gašpárkovej následne nadviazal Ing. Radovan Bujdák, ktorý počnúc od Ni_2O_5 sa v rámci svojho doktorandského štúdia zameriava na širšie spektrum doposiaľ neznámych oxidov niklu.

OBRÁZOK 2

Nové vrstevnaté štruktúry Ni_2O_5 predpovedané pomocou evolučných algoritmov. Horný obrázok: štruktúra s rovnými vrstvami. Dolný obrázok: štruktúra s pokrčenými vrstvami navzájom prepojenými kyslíkovými O-O mostíkmi. Malé červené guľičky reprezentujú kyslíkové atómy, veľké guľičky predstavujú niklové atómy.



Ing. Diana Fabušová sa ako študentka MTF STU venovala počítačovému DFT+EA modelovaniu PdO₂ v rámci svojej bakalárskej a magisterskej práce a mimoškolských aktivít. Momentálne pokračuje modelovaniu nových Pd-O v rámci doktorandského štúdia.

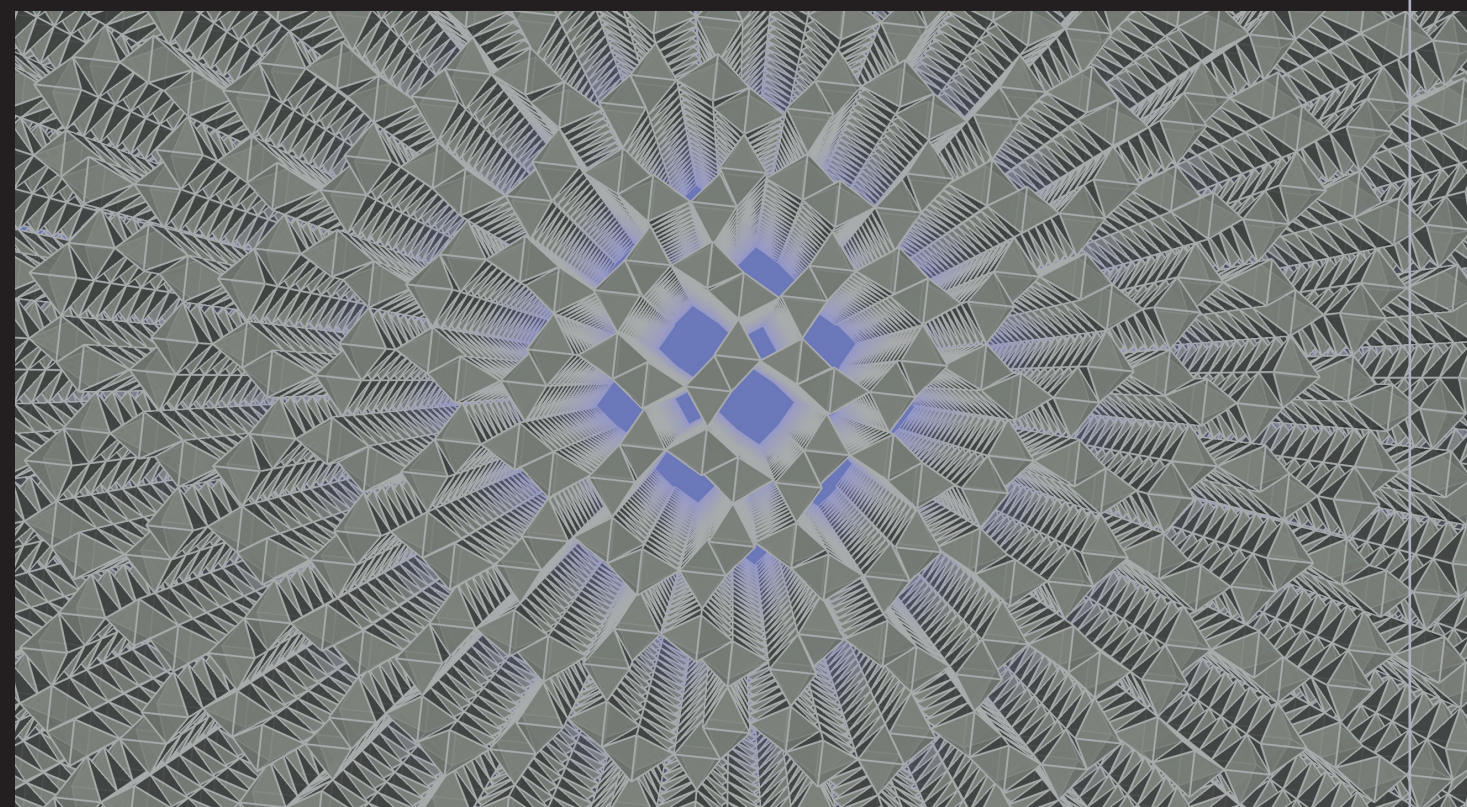
Paládium

Pd

46

Paládium

Situácia v binárnom systéme paládia s kyslíkom pripomína situáciu v Ni-O systéme. Podobne ako v prípade vyššie spomenutého niklu, má jednu dobre charakterizovanú fázu, oxid paladnatý PdO, a druhú slabo charakterizovanú, oxid paladničitý PdO₂. Oxid paladničitý bol prvýkrát získaný vo vysokotlakovej a vysokoteplotnej syntéze v roku 1978 a jeho kryštalová štruktúra bola navrhnutá na základe dát z röntgenových difrakčných meraní. Avšak na túto prácu nenadväzuje žiadna štúdia, ktorá by navrhnutú štruktúru PdO₂ vyvrátila alebo potvrdila. Paládium a jeho oxidy sú dôležitými katalyzátormi v mnohých odvetviach s obrovským významom v automobilovom priemysle. Prehĺbenie vedomostí o oxidoch paládia a predpoveď ich nových fáz sú z tohto dôvodu vysoko žiaduce. Kvantovomechanickému modelovaniu oxidu paladničitého sa v rámci svojej



bakalárskej a diplomovej práce venovala Ing. Diana Fabušová. Svoju bakalársku prácu venovala štúdiu polymorfizmu PdO₂ v normálnych podmienkach a v diplomovej práci skúmala štrukturálne zmeny a fázové prechody v dôsledku zvýšenej teploty a tlaku. Vďaka jej práci sme získali detailné informácie o kryštalovej štruktúre, ktorá bola navrhnutá v pôvodnom experimente a upresnili sme kryštalografický systém, v ktorom PdO₂ kryštalizuje. Zistili sme, že podobne ako jeho lepšie preštudovaný príbuzný PtO₂, môže existovať v rôznych polymorfoch. Takýto výsledok bol očakávaný, vzhľadom na fakt, že paládium a platina sa nachádzajú v tej istej 10. skupine v periodickej tabulke prvkov. Prekvapením bola predpoveď novej pórovitej štruktúry (Obrázok 3), ktorá je v prípade PtO₂ úplne neznáma. Naše výpočty naznačujú, že táto nová pórovitá štruktúra PdO₂ je vysoko stabilnou štruktúrou. Ide o významný výsledok, pretože pórovité štruktúry predstavujú atraktívne materiály v širokej škále aplikácií vrátane skladovania a separácie plynu, katalýzy, skladovania a konverzie energie, iónovej výmeny, senzorov rôzneho druhu v tom biosenzorov a v mnohých ďalších aplikáciách.

OBRÁZOK 3

Nová pórovitá PdO₂ štruktúra predpovedaná pomocou počítačového modelovania s využitím kvantovomechanických DFT metód.

MODELOVANIE A EXPERIMENT

Spolu s Dr. Pavlom Nogom a prof. Martinom Kusým (vľavo) školíme novú generáciu mladých materiálových výskumníkov v kombinovanom prístupe pri hľadaní nových funkčných materiálov, ktorý spája počítačové modelovanie s experimentálnymi technikami.



POČÍTAČOVÉ MODELOVANIE A EXPERIMENT

Počítačové modelovanie na atómovej škále predstavuje najmodernejší prístup pri objavovaní nových materiálov. Misiou nášho výskumného tímu a laboratória Počítačového modelovania materiálov je preto okrem samotného výskumu dosiahnuť, aby sa počítačové modelovanie stalo integrálnou súčasťou vývoja nových materiálov na Ústave výskumu progresívnych technológií MTF STU. Za týmto účelom úzko spolupracujeme s Oddelením iónových zväzkov a s Ústavom materiálov, kde naši kolegovia robia všetko preto, aby nami predpovedané materiály zhmotnili. Pod vedením **Ing. Pavol Noga, PhD.** sa nami predpovedané zlúčeniny snažia realizovať použitím fyzikálnych a fyzikálno-chemických metód, ako je syntéza pomocou iónového zväzku a reaktívne magnetronové naprašovanie, tiež v kombinácii s plazmou podporovanou iónovou implantáciou. Charakterizácia získaných materiálov prebieha v spolupráci s Ústavom materiálov. Primárnou metódou na detekciu kryštálovej štruktúry je röntgenová difrakcia, ktorej sa venuje **profesor Martin Kusý**. Spolu s profesorom Kusým a Dr. Nogom školíme novú generáciu mladých materiálových výskumníkov v kombinovanom prístupe pri hľadaní nových funkčných materiálov, ktorý spája počítačové modelovanie s experimentálnymi technikami.

VÝPOČTOVÉ ZDROJE, SPOLUPRÁCE A VÝSTUPY

Každý jeden výsledok, ktorý sme získali a opísali vyššie, predstavuje dni, týždne až mesiace čistého výpočtového času. Náš výskum by nebol možný bez dobre fungujúcej a výkonnej superpočítačovej HPC infraštruktúry, keďže väčšina našich simulačných úloh by nebola uskutočniteľná. Na paralelizované výpočty sme používali SIVVP infraštruktúru a to najmä superpočítač Aurel v SAV v Bratislave a klaster lokalizovaný v Košiciach, ako aj HPC infraštruktúru PRACE FENIX (projekt fnxp070004 at TGCC) vo Francúzku. Výsledky, ktoré sme získali vďaka slovenskej superpočítačovej infraštruktúre boli prezentované na viacerých medzinárodných konferenciách [1-14], boli tiež predmetom jednej bakalárskej [15] a dvoch diplomových prác [16,17] a momentálne sú predmetom dvoch doktorandských projektov [18,19].

Náš výskum by nebol možný bez dobre fungujúcej a výkonnej superpočítačovej HPC infraštruktúry, keďže väčšina našich simulačných úloh by nebola uskutočniteľná.

BIBLIOGRAFIA

- [1] D. Fabušová (študentka MTF STU), M. Derzsi, K. Tokár: *Design of atomistic models of little-known palladium oxide PdO₂*, The 2nd International Online Conference on Crystals MDPI, 2020.
- [2] S. Sampath, K. Tokar, M. Derzsi: *Mapping of novel binary copper oxides with density functional theory modelling*, The 2nd International Online Conference on Crystals MDPI, 2020.
- [3] S. Sampath, K. Tokár, M. Derzsi: *New binary copper oxide phases from ab initio*, YOUNG MULTIS 2021.
- [4] S. Sampath, K. Tokár, M. Derzsi: *Exploring novel binary copper oxides using density functional theory and evolutionary algorithms*, ASC Spring 2021 Virtual.
- [5] M. Gašpárková, K. Tokár, M. Derzsi: *Crystal and electronic structure and thermodynamic stability of nickel sesquioxide Ni₂O₃ from ab initio*, EUROMAT 2021 ONLINE.
- [6] D. Fabušová, M. Derzsi, K. Tokár: *Ab Initio Study of Impact of Pressure and Temperature on Stability and Polymorphism of PdO₂*, ES22 Online, Columbia University in the City of New York, 2022.
- [7] R. Bujdák, M. Gašpárková, M. Derzsi, K. Tokár: *Exploring new phases in Ni-O binary system from ab initio*, ES22 Online, Columbia University in the City of New York, 2022.
- [8] F. Ferenčík, J. Halanda, M. Kusý, T. Shen, D. Vaňa, M. Beňo, M. Derzsi, P. Noga: *Ion beam synthesis of high oxidation state palladium oxide nanoparticles*. ANPC 2021, Praha.
- [9] F. Ferenčík, J. Halanda, D. Vaňa, M. Derzsi, P. Noga: *Ion beam synthesis of high oxidation state palladium and copper oxides*, IBMM 2022, Lisbon.
- [10] D. Fabušová, K. Tokár, M. Derzsi, P. Piekarczyk, and P. T. Jochym: *Phase stability of PdO₂: The role of temperature and electron correlations*, Recent progress in ab initio phonon calculations, Cracow, 2023.
- [11] K. Tokár, M. Derzsi: *Dynamical properties of isolated silver difluoride 1D structure under strain*, Recent progress in ab initio phonon calculations, Cracow, 2023.
- [12] D. Fabušová, K. Tokár, M. Derzsi: *Study of PdO₂ polymorphism using Density Functional Theory (DFT) modelling*, 2. letná škola fyziky kondenzovaných látok, Liptovský Ján, 2023.
- [13] R. Bujdák, D. Fabušová, K. Tokár and M. Derzsi: *Ab initio study of novel Ni-O phase Ni₂O₅*, 2. letná škola fyziky kondenzovaných látok, Liptovský Ján, 2023.
- [14] R. Bujdák, D. Fabušová, K. Tokár and M. Derzsi: *First principles study of new nickel pentaoxide phase*, Open Science with Atomic Simulation Environment (workshop), Daresbury Laboratory, 2023.

- [15] D. Fabušová, Bakalárska práca (2020): *Návrh atomistických modelov málo známeho oxidu paládia PdO₂*, dostupná online na <https://opac.crzp.sk/>.
- [16] M. Gašpárková, Diplomová práca (2020): *Modelovanie kryštálovej štruktúry a termodynamické stability nového oxidu niklu Ni₂O₃*, dostupná online na <https://opac.crzp.sk/>.
- [17] D. Fabušová, Diplomová práca (2022): *Modelovanie fázových premien PdO₂ pod vysokým tlakom*, dostupná online na <https://opac.crzp.sk/>.
- [18] R. Bujdák: *Structural characterization of novel oxides of nickel and copper*, PhD projekt 2022-2025.
- [19] D. Fabušová: *Nové zlúčeniny s paládiom pre technologické aplikácie*, PhD projekt 2023-2026.

POĎAKOVANIE

Slovenská agentúra pre výskum a vývoj
grant č. APVV-18-0168

„Nové anorganické zlúčeniny s niklom, paládiom, meďou a striebrom: od DFT modelovania k syntéze pomocou iónových technológií“

Vedecká grantová agentúra Slovenskej republiky
grant č. VG 1/0223/19

„Modelovanie nových funkčných materiálov z prvých princípov“

Európsky fond regionálneho rozvoja, operačný program: výskum a inovácie
pre projekt č. ITMS2014+: 313011W085

„Vedeckovýskumné centrum excelentnosti SlovakION pre materiálový a interdisciplinárny výskum“

Počítačové modelovanie na atómovej škále predstavuje najmodernejší prístup pri objavovaní nových materiálov.

Využitie HPC na pochopenie zmien diverzity hubových spoločenstiev a monitoring biologických invázií

MIROSLAV CABOŇ
SLAVOMÍR ADAMČÍK



**Dr. Miroslav Caboň
a Dr. Slavomír
Adamčík
pôsobia ako
samostatní
vedeckí pracovníci
na Oddelení
biodiverzity
a ekológie
Botanického
ústavu CBRB SAV.**

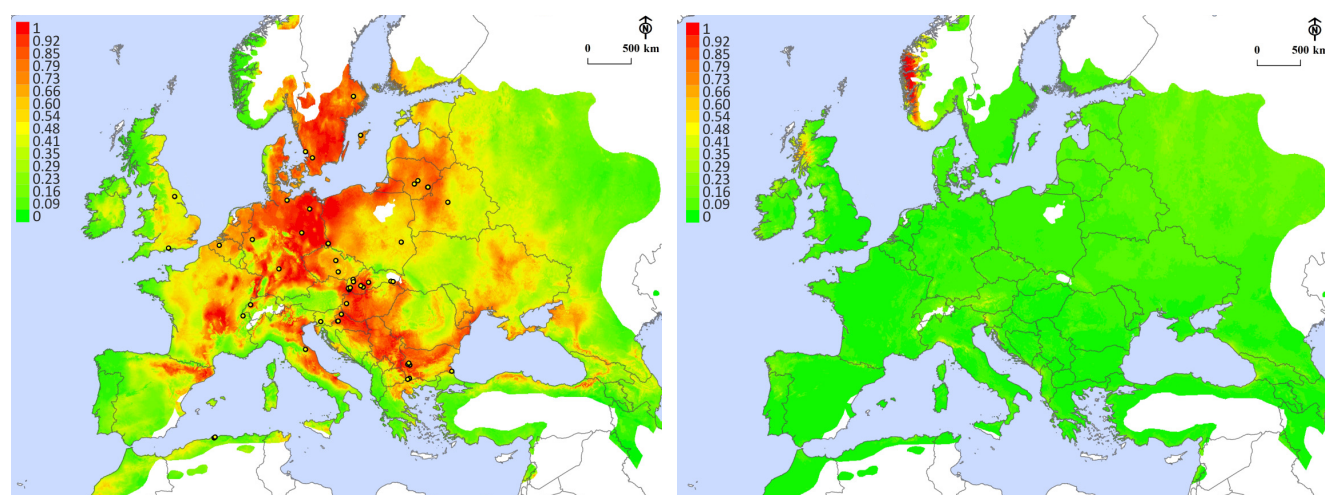
Hubové spoločenstvá sú veľmi dynamickým prostredím, ktoré vďaka ich enzymatickej aktivite a interakcii s rastlinami výrazne ovplyvňujú kvalitu pôdy a zloženie nadzemných rastlinných spoločenstiev. Z dôvodu odlišných klimatických nárokov jednotlivých húb na produkciu plodníc je veľmi ťažké odhadovať ich lokálnu diverzitu, pričom väčšinu času sú huby v spoločenstvách prítomné vo forme podzemných hýf.

Pokročilé molekulárne metódy známe ako sekvenovanie druhej generácie nám umožnili v posledných rokoch získať precíznejšie odhady hubovej diverzity, než aké by sme získali dlhodobým monitorovaním a opakovanými návštevami lokalít. Izoláciou hubovej DNA priamo z pôdy a následnou sekvenáciou získame milióny krátkych úsekov DNA, ktoré vieme priamo priradiť ku konkrétnym druhom pôdnych organizmov. Touto metódou zvanou metabarkóding získame pomerne presný obraz o diverzite pôdneho spoločenstva a vieme tak odhaliť zmeny v zložení diverzity spôsobené rôznymi vonkajšími faktormi. Spracovanie takéhoto množstva sekvencií

v krátkom čase však vyžaduje značnú výpočtovú kapacitu, preto je kľúčové mať prístup k spoľahlivej HPC infraštruktúre. Členovia Laboratória molekulárnej ekológie a mykológie (MEM) sú zodpovednými riešiteľmi národného projektu APVV, v ktorom využívajú metabarkóding na identifikáciu zmien hubových spoločenstiev vplyvom meniacich sa biotických alebo abiotických faktorov v okolí solitérnych stromov v krajine (APVV 20-0257 *Strom a krajina – vplyv drevín na diverzitu pôdnych mikroorganizmov v poľnohospodárskej krajine*). Chceme pochopiť, ako solitérne stromy a ich vplyvy (napr. zrážkový, veterný, slnečný tieň) vplývajú na kvalitu okolitej pôdy a miestne hubové spoločenstvá. Kladené otázky si vyžadujú spracovanie stoviek pôdnych vzoriek, preto chceme aj do budúcnosti využívať HPC infraštruktúru poskytovanú Výpočtovým strediskom SAV.

Druhou výskumnou témou, na ktorej sa v našom Laboratóriu spolupodieľame je pochopenie vplyvu rastlinných invázií na invadované biotopy a priamy dopad na pôdnu diverzitu. Biologické invázie sú jedným z najvýraznejších procesov spô-

sobujúci degradáciu biotopov a úbytok biodiverzity. Pod pojmom invázy organizmus rozumieme umelo zavlečené organizmy, ktoré sa v novom prostredí začínajú správať agresívne, rozširujú svoj areál výskytu a potláčajú pôvodné druhy, pričom častokrát nepriaznivo narúšajú ekologickú rovnováhu. Celkovo sa odhaduje, že invázne sa správa iba menej ako 10% nepôvodných druhov, pričom invázne organizmy nájdeme vo všetkých ríšach od rastlín, húb až po živočíchy. Obnova invadovaných biotopov býva častokrát veľmi náročná a je okrem iného spojená aj s výraznými

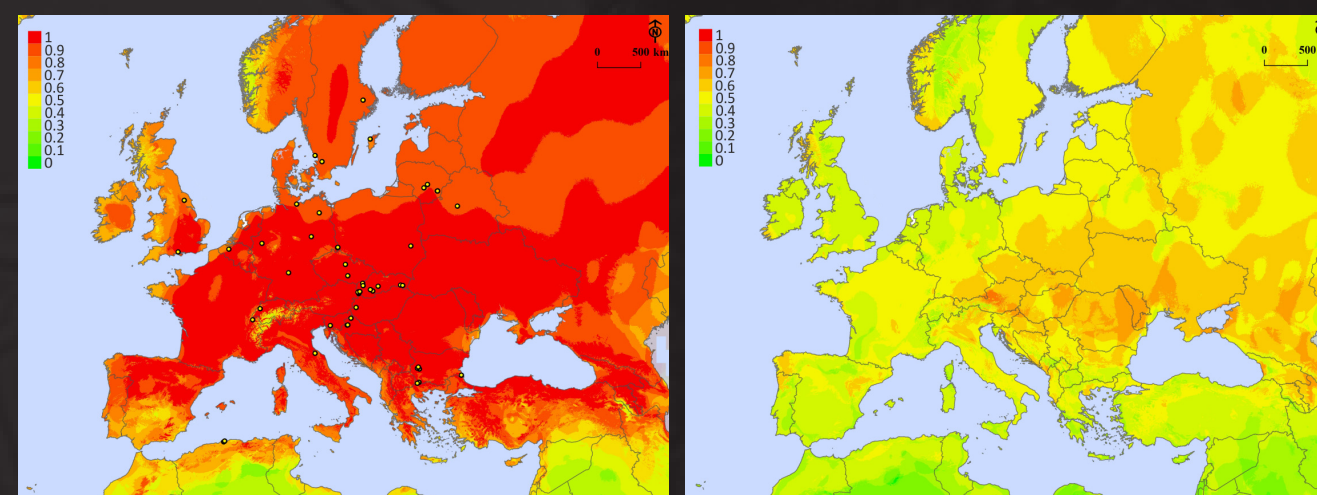


OBRÁZOK 1

Modely potenciálneho rozšírenia európskeho druhu *Phyllactinia fraxini* (vľavo) a ázijského *P. fraxinicola* (vpravo) v Európe. Publikované v Pastirčáková et al. 2021, (voľne šíriteľné, licencia CC BY 4.0).
 Autor výpočtov: RNDr. Dušan Senko, PhD. (Oddelenie evolúcie a systematiky, Botanický ústav CBRB SAV).

finančnými nákladmi. Z toho hľadiska sa biologickým inváziám venuje výrazná pozornosť a rôzne národné a medzinárodné zoznamy invázných a nepôvodných organizmov sú periodic-ky aktualizované. Na túto tému priamo nadväzuje prebiehajúci projekt APVV 19-0510 *Votrelci medzi nami: Časovo-priestorová dynamika rastlinných invázií a ich nepriaznivý dopad na ekosystémy* (vedúci projektu R. Hrivnák). Naším zámerom v tomto projekte je identifikácia hubovej zložky pôdy a pochopenie ich odpovedí na meniace sa prostredie.

Ďalšou oblasťou, v ktorej aktívne využívame HPC infraštruktúru je aj modelovanie klimatických nárokov druhov s invazívnym potenciálom a identifikácie zmien diverzity na invadovaných územiach. Modelovanie klimatických ník sa viaže k už ukončenému projektu APVV 15-0210 *Distribučný potenciál rôznych trofických skupín húb v Európe*, kde boli jedny z modelových organizmov fytopatogénne huby známe ako múčnatky. Tieto huby majú vyhranenú biologickú špecializáciu, ktorá spočíva v tom, že sa vyskytujú len na hostiteľských rastlinách určitých čeladi, rodov alebo druhov. Mnoho druhov múčnatiek rastie v celom areáli rozšírenia hostiteľskej rastliny, iné sa viažu len na určitú klimatickú oblasť. Areál väčšiny druhov je geograficky ohraničený na jednotlivé kontinenty alebo veľké oblasti, len málo druhov je globálne rozšírených, pričom najvyššia diverzita múčnatiek je v oblastiach s miernou a vlhkou klímou. Smerom k rovníku a k pólom intenzita ich výskytu, ako aj druhové spektrum výrazne klesajú. Poznatky o niektorých hospodársky významných druhoch múčnatiek rýchlo rastú, avšak len málo sa vie o ich druhovej rozmanitosti v relatívne veľkých geografických oblastiach. V našom projekte sme sa zamerali na múč-



OBRÁZOK 2

Predikcia potenciálneho rozšírenia európskeho druhu *Phyllactinia fraxini* (vľavo) a ázijského *P. fraxinicola* (vpravo) v Európe v roku 2050, modelované podľa súčasných klimatických scenárov. Publikované v Pastirčáková et al. 2021, (voľne šíriteľné, licencia CC BY 4.0).
 Autor výpočtov: RNDr. Dušan Senko, PhD. (Oddelenie evolúcie a systematiky, Botanický ústav CBRB SAV).

natky rodu *Phyllactinia* kolonizujúce jasene, ktoré sa vyskytujú nielen v Európe ale aj v Ázii. Z literatúry sú doposiaľ známe dva druhy: európsky *Phyllactinia fraxini* vyskytujúci sa na všetkých troch európskych druhoch jaseňov a ázijský *Phyllactinia fraxinicola* napádajúci široké spektrum jaseňov v juhovýchodnej ázii. Cieľom nášho výskumu bolo overiť, či sú tieto druhy rozdielne v ich klimatických nárokoch, alebo vysádzanie nepôvodných druhov jaseňov predstavuje riziko pre ich zavlečenie do nových oblastí.

V Európe sme potvrdili prítomnosť *Phyllactinia fraxini* na všetkých troch pôvodných európskych druhoch jaseňa a na dvoch ázijských druhoch vysadených v arboréte (*Fraxinus chinensis* ssp. *Rhynchophylla* a *Fraxinus mandshurica*). Modely potenciálneho rozšírenia oboch druhov *Phyllactinia* sa v Európe neprekrývajú a naše údaje neukazujú preferenciu žiadneho druhu pre mestské alebo pôvodné biotopy alebo konkrétny druh jaseňa. Ázijská múčnatka *P. fraxinicola* nie je prispôbená podmienkam prevládajúcim vo väčšine Európy a v súčasnosti nepredstavuje väčšiu hrozbu, ale na severozápade kontinentu sú niektoré oblasti, ktoré by mohli byť náchylné na inváziu. Nepôvodné jasene vysádzané v týchto oblastiach by preto mali byť prísnejšie kontrolované na prítomnosť múčnatiek, aby nepredstavovali bránu pre zavlečenie tohto druhu do Európy. Klimatické scenáre do r. 2050 ukázali nárast oblastí s vhodnou klímou pre rozšírenie oboch druhov, pričom centrum rozšírenia ázijského druhu sa presunie do Strednej až Juhovýchodnej Európy. V prípade európskeho druhu sa výrazne zväčšia oblasti s vhodnou klímou, ktoré zasiahnu väčšinu Európy. Je preto vhodné tomu venovať do budúca väčšiu pozornosť a myslieť na to pri plánovaných výsadbách.



Prenos a optimalizácia pracovného toku CFD výpočtov v HPC prostredí

Ján Škoviera¹
Sylvain Suzan²

¹Národné kompetenčné centrum pre HPC, Slovenské národné superpočítačové centrum

²Shark Aero

Spoločnosť Shark Aero navrhuje a vyrába ultralhké športové lietadlá s dvojmiestnym tandemovým kokpitom. Na vývoj dizajnu používajú populárny open-source softvérový balík openFOAM, konkrétne CFD simulácie (Computational Fluid Dynamics), využívajú metódu konečných prvkov (Finite elements method – FEM). Po vytvorení modelu pomocou softvéru Computer-Aided Design (CAD) sa model rozdelí na samostatné bunky, tzv. sieť (angl. mesh). Presnosť simulácie silne závisí od hustoty siete, pričom výpočtové a pamäťové požiadavky stúpajú s treťou mocninou počtu jej vrcholov. Pre niektoré simulácie môžu byť výpočtové nároky naozaj limitujúcim faktorom, ak používateľ pracuje s bežne dostupnou výpočtovou technikou. Pokúsili sme sa preto preniesť pracovný tok simulácie do High-Performance Computing (HPC) prostredia s osobitným zameraním na preskúmanie efektívnosti paralelizácie výpočtových úloh pre daný typ modelu.

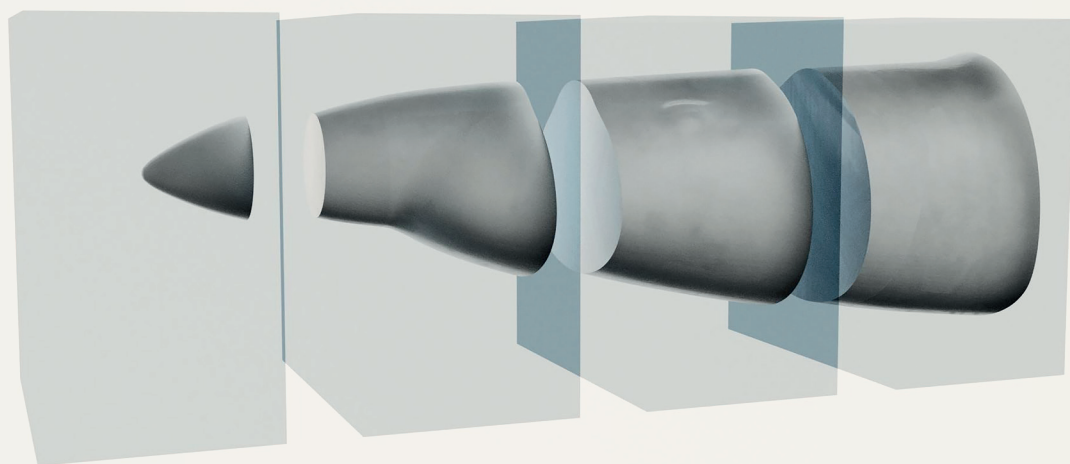


Pre tento projekt boli použité výpočtové uzly s 2x6 jadrami Intel Xeon L5640 @ 2,27GHz, 48 GB RAM a 2x500 GB. Všetky výpočty sa robili v štandardnom HPC prostredí s použitím systému plánovania úloh Slurm. Takéto riešenie je prijateľné pre typ výpočtových úloh, kde sa nevyžaduje odozva v reálnom čase ani okamžité spracovanie údajov. Pre CFD simulácie sme používali softvérové balíky OpenFOAM a ParaView verzie 9. Na spúšťanie výpočtov bol použitý kontajnerový softvér Sin-

Pre niektoré simulácie môžu byť výpočtové nároky naozaj limitujúcim faktorom, ak používateľ pracuje s bežne dostupnou výpočtovou technikou.

gularity s ohľadom na možný budúci prenos výpočtov na iný HPC systém. Podľa očakávania, zrýchlenie výpočtov dosiahnuté len samotným transferom do HPC prostredia bolo približne 1,5x v porovnaní so štandardným notebookom.

Paralelne vykonávané výpočtové úlohy môžu zvýšiť rýchlosť celkového výpočtu využitím viacerých výpočtových jednotiek súčasne. Pre paralelizáciu úlohy takéhoto typu je potrebné



OBRÁZOK 1

Ilustrácia segmentácie siete. Obklopujúci mesh je reprezentovaný priesvitnými kvádrmi.

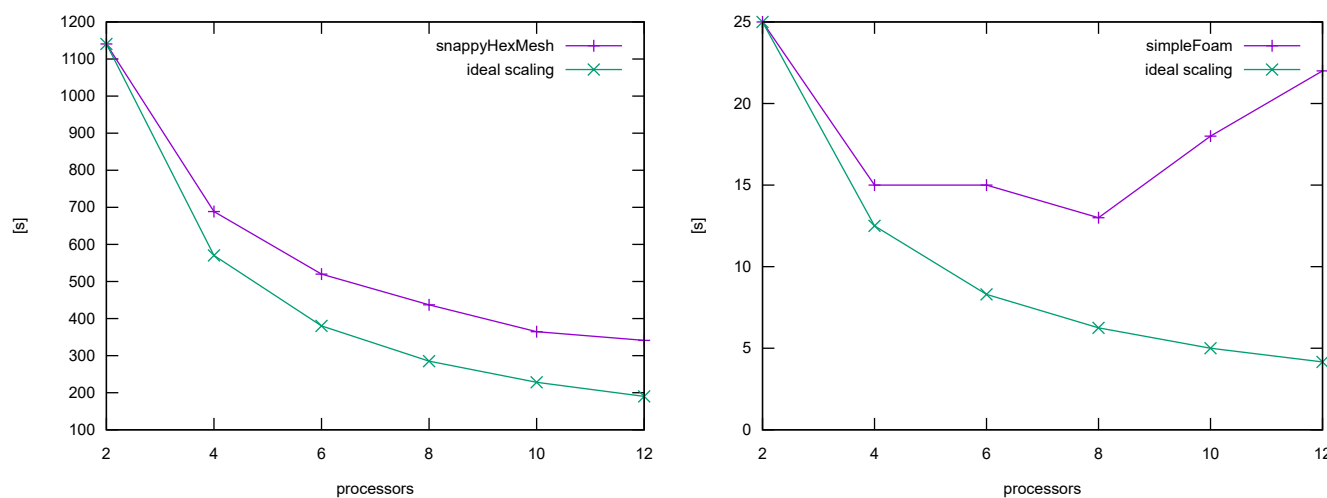
rozdeliť pôvodnú sieť na domény – časti, ktoré sa budú spracovávať súbežne. Domény však potrebujú komunikovať cez procesorové okrajové podmienky, t.j. steny domény alebo plochy v mieste rozdelenia pôvodnej siete. Čím väčšia je hraničná plocha procesora, tým viac I/O operácií je potrebných na vyriešenie okrajových podmienok. Dátová komunikácia procesorových okrajových podmienok je zabezpečená protokolom MPI (distributed memory Message Passing Interface), takže rozdiel medzi jadrami CPU a rôznymi výpočtovými uzlami je od používateľa abstrahovaný. To vedie k určitým obmedzeniam efektívneho využívania mnohých paralelných procesov, pretože príliš paralelizované vykonávanie úloh môže byť v skutočnosti pomalšie kvôli úzkym miestam v komunikácii a I/O. Preto by mali byť domény vytvorené spôsobom, ktorý minimalizuje hranice procesora. Jednou z možných stratégií je rozdeliť pôvodnú sieť iba v koplanárnom smere s čo najmenšou stranou

pôvodnej siete. Pri paralelizácii a definícii domén je potrebné dbať na množstvo prenášaných údajov – napríklad pri delení siete vo viacerých osiach sa vytvorí aj viac procesorových okrajových podmienok.

Výpočty sa robili v štyroch krokoch: generovanie siete, segmentácia siete, vnorenie modelu a simulácia CFD. Prvý krok – vytvorenie siete sme urobili pomocou utility blockMesh, nasledovala segmen-

Paralelne vykonávané výpočtové úlohy môžu zvýšiť rýchlosť celkového výpočtu využitím viacerých výpočtových jednotiek súčasne.

tácia siete pomocou utility decomposePar, vnorenie modelu pomocou programu snappyHexMesh a samotná CFD simulácia bola robená programom SimpleFoam. Výpočtovo najnáročnejší krok je snappyHexMesh. Je to pochopiteľné z toho, že kým pri CFD simulácii je potrebné vykonať výpočet niekoľkokrát pre každú hranu siete a každú iteráciu, v prípade vnorenia modelu sa vytvárajú nové vrcholy a staré sa vymazávajú na základe polohy vrcholov siete. To si vyžaduje vytvorenie „oktree“ (rozdelenie trojrozmerného priestoru jeho rekurzívnym rozdelením na osem oktantov), opakované inverzné vyhľadávanie a opätovné zaradenie do oktantov. Každý z týchto procesov je $N \cdot \log(N)$ v najlepšom prípade a N^2 v najhoršom prípade, kde N je počet vrcholov. Samotné CFD škáluje lineárne s počtom hrán, t.j. „takmer“ lineárne s N (prepojené sú len priestorovo blízke uzly). Vyvinuli sme pracovný postup, ktorý vytvára množstvo domén, ktoré môžu byť priamo paralelné s rovinou yz (x je os nosa lietadla), čo používateľovi zjednodušuje



OBRÁZOK 2

Závislosť reálneho výpočtového času od počtu výpočtových jednotiek pre snappyHexMesh and simpleFoam. V prípade simpleFoam-u čas začína divergovať pre 8 procesov a viac, nakoľko dátový transfér prekonáva paralelizáciu výhodu. Ideálne škálovanie ukazuje teoretický čas potrebný na dokončenie výpočtu v prípade, že by procesorové podmienky a dátový trasfér neboli zahrnuté.

rozhodovanie. Po zahrnutí nového modelu je možné jednoducho špecifikovať počet domén a spustiť výpočet, čím sa minimalizuje ľudský zásah potrebný na paralelizáciu výpočtu.

Relatívne zrýchlenie výpočtových procesov je určené najmä obmedzenými vstupmi/výstupmi. Ak sú výpočtové úlohy hlboko pod hranicou I/O operácií, rýchlosť je nepriamo úmerná počtu domén. Pri menej náročných výpočtoch, t.j. pri malých modeloch sa môžu procesy ľahko stať nadmerne paralelizovanými.

Keď je hustota siete dostatočne vysoká, čas na výpočet kroku CFD je tiež nepriamo úmerný počtu paralelných procesov. Ako je znázornené na druhej dvojici obrázkov s dvojnásobným zvýšením hustoty siete, výpočty sú pod hranicou I/O dokonca aj v CFD kroku. Aj keď je krok CFD v tomto prípade pomerne rýchly v porovnaní s procesom tvorby siete, výpočet dlhých časových intervalov by z neho mohol urobiť časovo najnáročnejší krok.

Návrh častí lietadla vyžaduje viacnásobné simulácie relatívne malých modelov za meniacich sa podmienok. Hustota siete potrebná pre tieto simulácie patrí do strednej kategórie. Pri prenose výpočtov do HPC prostredia sme museli brať do úvahy skutočné potreby koncového užívateľa z hľadiska veľkosti modelu, hustoty siete a požadovanej presnosti výsledku. Používanie HPC má niekoľko výhod:

- Koncový používateľ nepotrebuje udržiavať svoje vlastné výpočtové kapacity.
- Aj v prípade, že by simulácie boli obmedzené na úlohy s jedným vláknom (neparalelizované), ich prenos do HPC prostredia predstavuje zrýchlenie, navyše s možnosťou použitia tzv. embarrassingly parallel prístupu.
- Pre ďalšie zefektívnenie výpočtov bol navrhnutý jednoduchý spôsob využitia paralelizácie pre tento konkrétny typ úloh. Identifikovali sme obmedzenia paralelných behov pre definovaný prípad použitia a podmienky. Celkové zvýšenie rýchlosti, ktoré bolo dosiahnuté v praktických podmienkach, je 7,3-násobné. Vo všeobecnosti je možné očakávať zrýchlenie rastúce so zložitosťou výpočtu a presnosťou/hustotou siete.





03

Popularizácia HPC

Krátke správy

EuroCC 2

V januári tohto roka odštartoval projekt EuroCC 2, v rámci ktorého realizujeme aktivity Národného kompetenčného centra pre HPC. Hostiteľskou inštitúciou je Národné superpočítačové centrum. Projekt je zameraný najmä na rozvoj kompetencií a služieb v oblasti vysokovýkonného počítania a podporu malých a stredných podnikov, akademických pracovísk a verejnej správy formou spolupráce na vývoji riešení založených na HPC technológiách.

Národné kompetenčné centrum pre HPC na Dni Európy

Dňa 9. mája v bratislavskej Starej tržnici prebiehala „oslava narodenín“ Európskej únie. Podujatie Deň Európy organizovala Kancelária Európskeho parlamentu a Zastúpenie Európskej komisie. Na Dni Európy predstavil svoje aktivity aj tím Národného kompetenčného centra pre vysokovýkonné počítanie. Dňom Európy si pripomíname Schumanovu deklaráciu, ktorá odštartovala modernú európsku integráciu a viedla k vytvoreniu súčasnej Európskej únie ako unikátneho mierového a demokratického projektu.

Širokej verejnosti boli k dispozícii informačné stánky členských krajín EÚ, Európskeho parlamentu a Európskej komisie. Na podujatí nechýbal ani stánok Národného kompetenčného centra pre vysokovýkonné počítanie (NCC pre HPC). Tím NCC predstavil aktivity a služby Národného kompetenčného centra pre HPC. Prostredníctvom interaktívnej ukážky simulá-

cíí potenciálnych liečiv proti ochoreniu Covid-19 sme priblížili účastníkom, na aké výpočty sa môžu superpočítače využívať. Počas podujatia na pódiu vystúpila Lucia Demovičová a predstavila verejnosti Národné kompetenčné centrum pre HPC. Vysvetlila, ako kompetenčné centrum môže pomôcť vedcom, výskumníkom, ale v neposlednom rade aj malým a stredným podnikateľom. Uviedla aj úspešné príklady spolupráce so súkromným a verejným sektorom.



eurocc.nsc.sk

TREX CoE & NCCs collab Code tuning for the exascale

Centrum excelentnosti TREX spolu s 3 národnými kompetenčnými centrami zorganizovalo trojdňový workshop „Ladenie kódu pre exascale“. NCC Slovensko, Rakúsko a Česká republika sa spojili, aby priniesli zaujímavý program vrátane pokročilého paralelného programovania, analýzy energetickej účinnosti a optimalizácie HPC aplikácií. Workshop sa konal v Bratislave v dňoch 5. – 7. júna 2023 a bol organizovaný prezenčnou formou.

Bol to výborný príklad spolupráce a podpory medzi kompetenčnými centrami a centrom excelentnosti. Program workshopu zahŕňal tri navzájom sa dopĺňajúce témy. Počas prvého dňa tím z rakúskeho NCC prezentoval pokročilé techniky paralelného programovania (MPI, OpenMP), na druhý deň nasledovala prezentácia vysoko aktuálnej témy energetickej efektívnosti v HPC zo strany českého NCC. Tretí deň patril TREX CoE, ktorý predstavil nástroj na analýzu výkonu HPC aplikácií a ich optimalizáciu s názvom MAQAO. Organizáciu, prístup k HPC a technickú podporu HPC zabezpečilo slovenské NKC.



Pracovná skupina národných kompetenčných centier v strednej Európe

Zástupcovia národných kompetenčných centier pre HPC zo stredoeurópskeho regiónu sa 12. júna stretli na prvom stretnutí stredoeurópskej pracovnej skupiny NCC. Podujatie zorganizovali NCC Slovinsko a NCC Rakúsko v slovinskom Maribore, účasť bola možná aj online.

Na programe dňa boli 3 sekcie, ktoré sa týkali interakcie s priemyslom, vzdelávania a komunikácie. Účastníci pracovali v malých skupinách, diskutovali o konkrétnych bodoch a vymieňali si osvedčené postupy v rámci jednotlivých tém, ako sú stratégie onboardingu MSP, portfólio služieb a ako riešiť špecifické otázky štátnej pomoci, ako aj pravidlá spolupráce so súkromnými spoločnosťami.

Diskutovalo sa o formátoch školiacich podujatí s ohľadom na postpandemické trendy; boli vyzdvihnuté skúsenosti so spo-



lupracou medzi NCC a centrami excelentnosti a zdieľali sa aj rôzne stratégie prilákania účastníkov MSP na odborné kurzy.

Komunikačná sekcia bola zameraná na propagáciu a komunikačné kanály, budovanie publika pre rôzne témy a organizáciu tematicky zameraných webinárov. V každej sekcii sa diskutovalo aj o príležitostiach a ponukách na spoluprácu.

Podujatie bolo skvelou príležitosťou na zoznámenie sa s kolegami zo susedných NCC, neformálny networking, podporu spolupráce a nájsenie novej inšpirácie.

2023

RIADITEĽ VS SAV

Michal Kadúč

ZODPOVEDNÝ REDAKTOR

Lucia Demovičová

GRAFIKA A DTP

Gabriela Obadalová

FOTOGRAFIE

Pavol Novák

Shutterstock

PERIODICITA

Raz ročne

VYDAVATEĽ

Centrum spoločných

činností SAV, v. v. i.

Výpočtové stredisko SAV

Dúbravská cesta 9

845 35 Bratislava

Slovenská republika

Tel.: +421 (0)2/3229 3111

Fax: +421 (0)2/3229 3103

E-mail: vssav@savba.sk

www.vs.sav.sk

ISBN 978-80-89871-18-6

ISSN 2729-9090

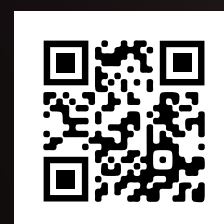
Texty neprešli jazykovou korektúrou.



Centrum spoločných činností SAV, v. v. i.
Výpočtové stredisko SAV

Dúbravská cesta 9
845 35 Bratislava
Slovenská republika

www.vs.sav.sk



ISBN 978-80-89871-18-6
ISSN 2729-9090