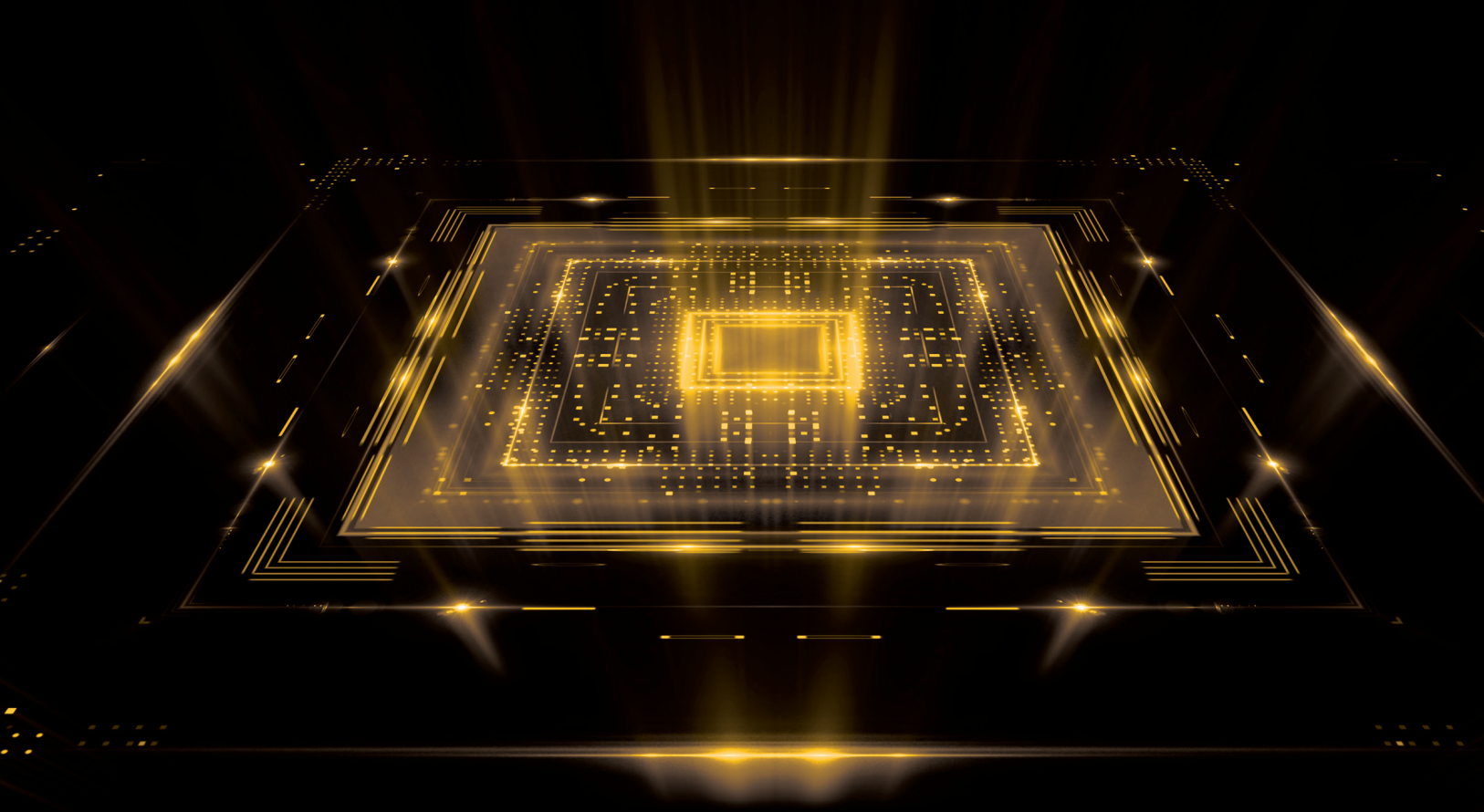


hpc focus



Úvodné slovo redakcie

Vážené čitateľky a čitatelia, vážení používatelia
a priaznivci HPC,

po dlhšom čase sa vám prihovráame prostredníctvom časopisu HPC Focus. Od posledného vydania sa v oblasti vysokovýkonného počítania na Slovensku udiali viaceré zmeny. Niektoré možno ostali nepovšimnuté, niektoré mali väčší ohlas v médiách, no veríme, že majú potenciál nás a celú slovenskú HPC komunitu posúvať vpred.

V apríli 2021 sme uzavreli úspešný projekt SIVVP, vďaka ktorému sme obstarali a v roku 2012 sprevádzkovali prvý slovenský superpočítač Aurel, ako aj ďalšie výpočtové klastre v Bratislave, Žiline, Košiciach a Banskej Bystrici. **Na tomto mieste chceme úprimne poďakovať všetkým našim partnerom, ktorí sa na projekte podieľali: Žilinská Univerzita, Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Technická Univerzita v Košiciach, Ústav experimentálnej fyziky SAV v Košiciach, Ústav informatiky SAV v Bratislave, Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici.** Projekt SIVVP, ktorý znamenal výkonnostný a kapacitný skok v možnostiach vysokovýkonných výpočtov na Slovensku má úctyhodných 145 výstupov vo forme odborných vedeckých publikácií našich používateľov. Možnosť využívať Aurela, ako aj ďalšiu infraštruktúru SIVVP, však mali z povahy projektu len vedecké a výskumné tímy z verejných slovenských univerzít a Slovenskej akadémie vied.

Jednou zo spomínaných zmien je, že úlohu inštitúcie, ktorá bude slúžiť ako prvý kontakt pre záujemcov o HPC, preberie postupne **Národné kompetenčné centrum pre HPC (NCC)**. A to sa okrem služieb pre akademický sektor bude zameriavať aj na spoluprácu s malými a strednými podnikmi, firmami z priemyslu a inštitúciami verejnej správy.

Národné kompetenčné centrum pre HPC je súčasťou Európskej siete 33 kompetenčných centier a vzniklo v rámci projektu EuroCC. Naše úsilie bude smerovať k zvyšovaniu povedomia o HPC na Slovensku, ako aj rozširovaniu kompetencií v oblastiach vysokovýkonného počítania, vysokovýkonnej dátovej analytiky (HPDA), strojového učenia (ML) a umelej inteligencie (AI). Do portfólia našich služieb teda budú patriť vzdelávacie kurzy a semináre, konzultácie a poradenstvo pri implementácii HPC riešení, či pilotných projektoch.

Otváranie a rozširovanie slovenskej HPC komunity vnímame ako významný krok v kontexte Digitálnej transformácie a prechodu na Priemysel 4.0. Využívanie HPC+ nástrojov v podnikaní a priemysle, no i vo verejnej správe a vede prispeje k napĺňaniu a zvyšovaniu inovačného potenciálu na Slovensku.

Počas uplynulých mesiacov na Slovensku vzniklo aj Národné superpočítačové centrum (NSCC), ktoré ako združenie akademického, súkromného i štátneho sektora bude formovať doteraz chýbajúcu a zároveň veľmi potrebnú národnú víziu a stratégie v oblasti rozvoja a podpory HPC. Už dnes sa do slovenského Plánu obnovy a rozvoja podarilo presadiť vyčlenenie prostriedkov na nový superpočítač, ktorého vybudovanie je jedným z cieľov NSCC v najbližších rokoch.

Kým sa však vízie a plány podarí pretaviť do reálnych projektov a „železa“, uvedomujeme si nevyhnutnosť rozvoja slovenskej HPC infraštruktúry v krátkodobom horizonte. V rámci operačného programu Integrovaná infraštruktúra (OPII) sa nám podarilo získať prostriedky na obstaranie nových výpočtových kapacít, ktoré by sme radi uviedli do prevádzky už začiatkom budúceho kalendárneho roka.

Vážené čitateľky a čitatelia, dúfame, že sa nám podarí avizované zmeny realizovať tak, aby sme vám mohli ponúknuť aj naďalej kvalitné služby a podporu. Určite oceníme vašu spätnú väzbu a budeme radi, ak sa slovenská HPC komunita bude naďalej rozvíjať a ak budete spolu s nami jej aktívnou súčasťou.



Strana 04 – 27

HPC

Rozhovor o vzniku Národného superpočítačového centra, články o projekte EUROCC, do ktorého sa zapojilo CSČ SAV, o kúpe novej HPC infraštruktúry či o projekte EUROHPC JU.

Strana 26 – 53

APLIKÁCIE V PRAXI

Články oslovených užívateľov superpočítača AUREL: prof. Ivan Štich, DrSc., Ing. Eva. Scholtzová, CSc. a Ing. Michal Hricovíni, PhD.; ako i zaujímavý článok od tímu odborníkov zo SHMÚ pripravujúcich predpovede počasia.

Strana 54 – 63

POPULARIZÁCIA HPC

Stať, v ktorej sa dočítate o aktivitách, ktoré pre vás pripravuje NCC, NSCC, CSČ SAV a VS SAV v spolupráci s PRACE.

46 Terabit/sec
Optical Backplane

01

NSCC
NCC PRE HPC
EUROHPC

hpc focus

Národné superpočítačové centrum

ROZHOVOR S LUKÁŠOM DEMOVIČOM A RADOSLAVOM REPOM

18. novembra 2020 vzniklo **Národné superpočítačové centrum** (NSCC), ktoré by na Slovensku malo zastrešovať všetky HPC aktivity. Predpokladá sa, že bude úzko spolupracovať s Národným kompetenčným centrom pre HPC, podporovať vzdelávanie a investície do rozvoja HPC na Slovensku a prevádzkovať národnú HPC infraštruktúru. Členmi tohto združenia sú zástupcovia súkromného aj štátneho sektora. Štát v NSCC zastupujú Slovenská akadémia vied a Ministerstvo investícií, regionálneho rozvoja a informatizácie Slovenskej republiky (MIRRI SR), súkromný sektor zastupuje združenie I4DI (Innovations for Digital Infrastructure), ktorého zakladajúcimi členmi sú spoločnosti Towercom, PosAm, IPM group a Tachyum. Jed-

ným z cieľov NSCC je aj vybudovanie nového superpočítača s unikátnym hardvérovým riešením spoločnosti Tachyum, ktorý by sa výkonnostne radil medzi európsku špičku. O NSCC sa rozprávame s členmi jeho správnej rady PhDr. Radoslavom Repom (MIRRI) a Mgr. Lukášom Demovičom, PhD. (SAV).

NSCC je unikátne spojením štátneho, súkromného a akademického sektora. Ako a kedy vôbec vznikla myšlienka založiť národné centrum, ktoré by sa venovalo práve vysokovýkonnému počítaniu?

RR: S myšlienkou prepojiť všetky tri sektory v rámci osobitnej platformy s vlastnou subjektivitou prišli pred dvomi rokmi zástupcovia sekcie digitálnej agendy na dnešnom MIRRI, teda aj ja, ako generálny riaditeľ tejto sekcie. V minulosti som pracoval v Bruseli práve s európskou digitálnou agendou. Navrhoval som teda, aby

sme vytvorili vlastný subjekt, ktorého členovia by priniesli do spoločného projektu vyššiu pridanú hodnotu, a to každý za oblasť v ktorej má jednak kompetencie a zároveň zručnosti. Konkrétne MIRRI ako partner, ktorý je zodpovedný za negociáciu aj implementáciu európskych digitálnych politík, SAV s Centrom spoločných činností SAV ako partner zodpovedný za doterajšiu prevádzku národnej HPC infraštruktúry a združenie I4DI vrátane spoločnosti Tachyum s významným inovačným potenciálom. Spojenie týchto partnerov s vytvorenými medzinárodnými aj domácimi kontaktmi a s jasným cieľom realizácie indikovaného projektu vysokovýkonného superpočítača má tým pádom zabezpečenú dostatočnú motiváciu a smerovanie. Dôležitá je tiež politická podpora projektu, ktorá je takto garantovaná úrovňou podpredsedu vlády, ako aj vládnymi materiálmi. Treba tiež dodať, že spojenie typu triple helix, kde sa prelína spolupráca akademického, súkromného aj verejného sektora v oblasti rozvoja digitálnej ekonomiky zadefinovala po prvý krát Stratégia digitálnej transformácie Slovenska 2030 a jej akčný plán. Podobné prepojenia už vznikli, resp. vznikajú aj v oblasti digitálneho vzdelávania, umelej inteligencie, kvantovej infraštruktúry a ďalších.

Ako dosiaľ hodnotíte spoluprácu týchto troch sektorov a aké sú ich úlohy v rámci NSCC?

RR: Môžem potvrdiť, že spolupráca je pracovná a korektná. Keď komunikujete tému, ktorá je v prostredí Slovenska vysoko inovatívna a jej uplatnenie prekračuje hranice krajiny, vždy narazíte na otázky ohľadom zmysluplnosti a opodstatnenosti daného riešenia pre vedu, pre podniky, pre Slovensko ako také. Netvrdím preto, že vzájomné strategické či operatívne debaty medzi partnermi, ktoré sú pomerne časté, nemajú aj seba vlastnú dynamiku, avšak hodnotím ich kladne, keďže sa nám vždy podarí nájsť kompromisné a pre všetky strany výhodné riešenie. Priradené sa stáva, že partneri sa dostanú aj do argumentačnej opozície, čo vychádza aj s ich logického nastavenia, kedy proti sebe stoja úplne odlišné svety, napr. verejný vs. súkromný sektor alebo aj akadémia, avšak podstatný je výsledok, ktorý bude postavený na právnej istote, jasných pravidlách a zároveň udržateľnom realizačnom modeli. Ak sa nám ho podarí zadefinovať, nebojím sa prehlásiť, že vysokovýkonný počítač dobudujeme. Najbližším krokom je štúdia uskutočniteľnosti, ktorá takejto ambícii dá zároveň ekonomický *raison d'être*.

Máme zadefinovaný a schválený ročný pracovný program, ktorý realizujeme. Najväčší záber si doteraz vyžiadala práca



Lukáš Demovič pôsobí ako riaditeľ Centra spoločných činností SAV a predseda správnej rady NSCC.



na Pláne obnovy a odolnosti, ako aj identifikácia a vyhodnocovanie vhodnosti zapájania sa do cezhraničných projektov na rozvoj superpočítačovej infraštruktúry a budovania ich kapacít. NSCC je okrem iného dôležité vnímať ako styčný bod širšej siete európskych superpočítačových centier, čo samo so sebou prináša množstvo expertných výziev a úloh. Ľudské kapacity tímu NSCC sú zatiaľ veľmi obmedzené, čo bol zároveň iniciálny plán s cieľom racionalizácie finančných prostriedkov na prevádzku. Primárne sa do práce zapájali odborné aj manažérske kapacity MIRRI, SAV aj I4DI. Od apríla v NSCC pracuje jeden odborný zamestnanec, ktorý má na starosti najmä operatívnu. Čoskoro pribudne ďalší.

LD: Ja len doplním, že NSCC je novovzniknutá právnická osoba, a tak bolo potrebné na rozbeh nielen vybaviť všetky potrebné dokumenty, ale hlavne nastaviť si vnútorné pravidlá a postupy kooperácie všetkých troch zakladajúcich členov. A samozrejme, nejakú dobu trvá, kým sa vôbec partneri naučia hovoriť spoločným jazykom – keďže v správnej rade máme pomerne široké spektrum ľudí s rôznymi odbornosťami. Myslí si však, že sme nastolili veľmi dobrú cestu a mnohé „det-ské choroby“ sa nám už podarilo vychytať. Osobne sa mi veľmi páči možnosť interakcie s ľuďmi z MIRRI, ako sú Radoslav Repa, Juraj Kubica alebo Michal Číž, ktorí majú aktuálny prehľad o plánovaných aktivitách na národnej a európskej úrovni a vedia aj zadefinovať najlepšie postupy pri tvorbe takýchto rozsiahlych projektov. Zvlášť výborne hodnotím operatívnu spoluprácu pri zapracovávaní témy superpočítača do Plánu obnovy a odolnosti.

Keď bolo v novembri 2020 NSCC založené, okamžite sa vynorili očakávania a informácie spojené s budovaním nového superpočítača. Aké ambície má centrum v tomto smere?

RR: Presne tak. Primárnou ambíciou NSCC je vybudovať vysokovýkonný superpočítač. Z Plánu obnovy a odolnosti máme na tento účel vyhradené prostriedky. Ďalšie investičné možnosti sa nám ponúkajú z priamo riadených programov EÚ, ako je napríklad Program pre digitálnu Európu. Ten priamo vyzýva členské štáty, aby investovali prostriedky do budovania superpočítačov. Európa si zobrala za cieľ vytvorenie vlastnej nezávislej výpočtovej infraštruktúry, čo má dopad na vyššiu úroveň kybernetickej bezpečnosti, ako aj vyššej dôvery v jednotný digitálny trh. Našími krokmi chceme k tomu prispieť.

LD: Superpočítač by mal mať parametre, ktoré ho zaradia medzi európsku špičku. Či už výkonom, ale aj dôrazom na

efektivitu jeho prevádzky, či možnosťami využitia pre najrôznejšie druhy aplikácií. Pre takto výkonné zariadenie však momentálne nemáme na Slovensku vhodné priestory, aj preto chceme jeho budovanie realizovať po fázach. V nich sa bude postupne testovať každá z plánovaných technológií tak, aby potom realizácia stroja s plným výkonom prebehla čo najhladšie. Paralelne s týmto procesom sa popritom bude realizovať výstavba alebo upgrade datacentra.

Aké ciele a plány má NSCC okrem vybudovania superpočítača?

RR: Nový vysokovýkonný superpočítač je samozrejme prvou a vysoko aktuálnou témou. Okrem tejto témy má NSCC v stanovách zakotvený celý rad ďalších úloh, cieľov a plánov v rámci superpočítačovej agendy. Účelom združenia je napríklad podpora a rozvoj aplikácií, implementácie, výskumu, vývoja vysokovýkonných výpočtových systémov v Slovenskej republike so zreteľom na štátnu štruktúrnu, priemyselnú, technickú, regionálnu a sociálnu politiku.

LD: Samotný superpočítač nám bude bez dobre rozvinutého prostredia a používateľskej komunity nanič. NSCC preto už pred jeho uvedením do prevádzky „pripravuje pôdu“ jednak zvyšovaním povedomia o HPC, ale aj priamou podporou a konzultáciami s používateľmi z akademického, ale aj súkromného sektora. Je to aj vďaka európskym projektom PRACE a EuroHPC, v ktorých je za NSCC zapojené Centrum spoločných činností SAV. Vďaka týmto projektom si európske krajiny vymieňajú skúsenosti, prepájajú svoju HPC infraštruktúru, organizujú tréningové aktivity, ale aj vyvíjajú aplikácie pre budúce superpočítače. Pri budovaní vzťahov so súkromným sektorom a HPC komunity ako takej bude NSCC úzko spolupracovať s Národným kompetenčným centrom.

NSCC má záujem aj o prepájanie sa a úzku spoluprácu s organizáciami, ktoré sa venujú príbuzným témam, ako sú umelá inteligencia, kvantové technológie, či bezpečnostné technológie.

**PRIMÁRNOU AMBÍCIOU NSCC JE
VYBUDOVAŤ VYSOKOVÝKONNÝ
SUPERPOČÍTAČ.**



Radoslav Repa zastáva funkciu generálneho riaditeľa Sekcie digitálnej agendy. Zamieriava na finálnu fázu realizácie iniciatív Stratégie digitálneho jednotného trhu, ako aj na implementáciu novo prijatej Stratégie digitálnej transformácie Slovenska do roku 2030.

NCC pre HPC otvára svoje brány

Čo to znamená pre používateľov HPC na Slovensku?

Centrum spoločných činností SAV sa zapojilo do projektu EuroCC, vďaka ktorému v európskom priestore vznikla sieť Národných kompetenčných centier pre HPC. Projekt podporuje organizácia EuroHPC JU a jeho implementáciu vo všetkých zúčastnených krajinách koordinuje a podporuje aj projekt Castiel CSA. Národné kompetenčné centrá sa stanú primárnym kontaktným bodom pre oblasť HPC v jednotlivých štátoch a budú zabezpečovať služby ako vzdelávanie, poradenstvo či prístup k výpočtovým prostriedkom pre používateľov z akadémie, verejnej správy aj súkromného sektora.

Projekt EuroCC odštartoval 1. septembra 2020 a tím CSČ SAV začal hneď uskutočňovať všetky potrebné kroky na zabezpečenie fungovania Národného kompetenčného centra pre HPC (NCC pre HPC). Projekt má trvať 2 roky a počas tohto obdobia by malo NCC začať naplňať svoju misiu, ktorá je definovaná pomerne široko: od propagácie HPC riešení a nástrojov vysokovýkonnej dátovej analýzy, strojového učenia a umelej inteligencie (tzv. HPC+ nástroje), poskytovania technického poradenstva a konzultačných služieb až po vzdelávacie aktivity, kurzy a budovanie HPC komunity. Keďže je NCC súčasťou medzinárodnej siete kompetenčných centier,

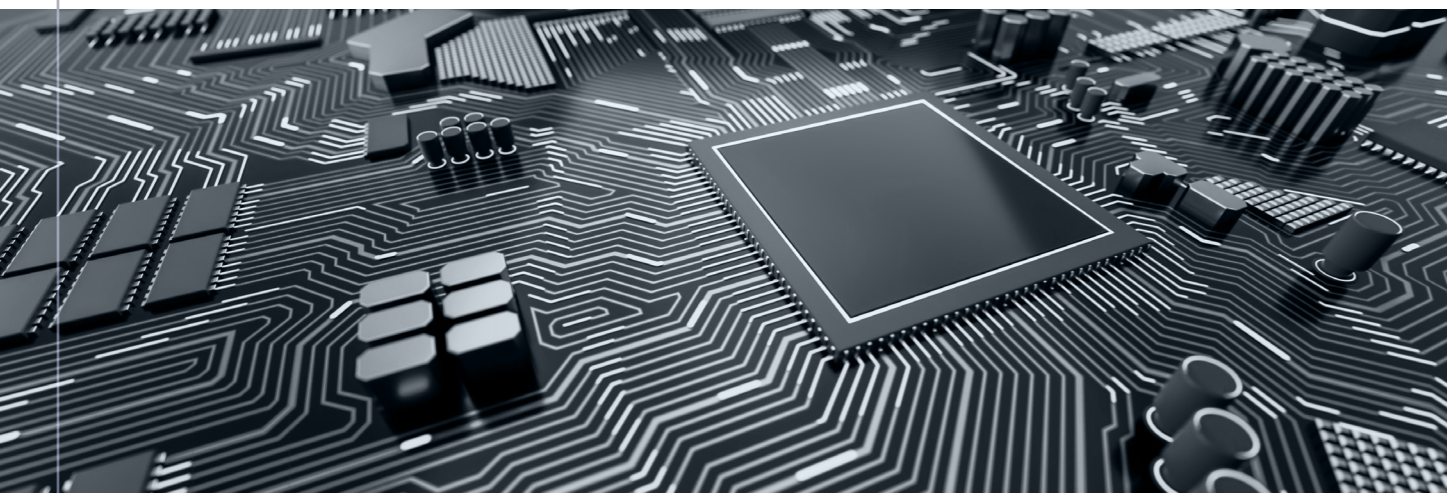
môže sa spoľahnúť na svojich partnerov pri transfere technológií a vedomostí, a tak dokáže poskytnúť svojim klientom služby na európskej úrovni.

Čo to znamená pre používateľov HPC na Slovensku? Doteraz boli aktivity v oblasti HPC zastrešené projektom SIVVP: registrácia používateľov, podávanie projektov, prístup k výpočtovým prostriedkom aj technická podpora. Tieto funkcie postupne prevezme NCC pre HPC a bude ich ďalej rozvíjať a rozširovať. Služby dizajnujeme tak, aby zodpovedali dobrej praxi v Európe, ako aj požiadavkám používateľov. V gescii Národného kompetenčného centra sa pripravuje nový registračný portál pre používateľov HPC, nový systém podávania a hodnotenia projektov, ale aj nové služby pre používateľov.

Národné kompetenčné centrum má samostatnú webovú stránku /eurocc.nsc.sk/ s informáciami o aktivitách a službách, ktoré poskytuje. Medzi novinky patria bezplatné kurzy nielen pre používateľov HPC, ale aj pre širšiu verejnosť, ktoré v súčasnosti prebiehajú online. Nachádzajú sa tu aj informácie o grantových príležitostiach pre používateľov. Medzi výzvy na podávanie projektov pravidelne vyhlasované organizáciami PRACE a EuroHPC

JU patria PRACE Access, PRACE Shape, PRACE Deci alebo FF4EuroHPC. Okrem akademického výskumu tieto schémy podporujú aj malé a stredné podniky predovšetkým umožnením prístupu k výpočtovým prostriedkom v Európe a úzkou spolupracou s HPC expertmi, no i poskytovaním finančných prostriedkov.

Národné kompetenčné centrum pripravuje aj prístup k návodom a manuálom pre používateľov, ktorí na jednom mieste nájdu dokumentáciu k výpočtovej infraštruktúre, prihlasovaniu a spúšťaniu výpočtových úloh, ako aj kompilácii programov a používaniu



jednotlivých aplikácií. V pláne do budúcnosti je aj sprístupnenie tzv. easy-access nástrojov, ktoré zjednodušia a spríjemnia prácu používateľom.

Mapovanie HPC+ kompetencií bude ďalšou úlohou Národného kompetenčného centra. Prieskum zameraný na akademický, verejný aj súkromný sektor bude mať za cieľ získať informácie o HPC kompetenciách, využívaní HPC riešení a možnostiach adopcie týchto nástrojov na Slovensku. Táto tzv. mapa kompetencií bude predstavovať východisko pre ďalšiu stratégiu rozširovania HPC komunity a rozvoja spolupráce v oblasti HPC. Je pravdepodobné, že v akademickej sfére sa ukáže miera znalostí a kompetencií porovnateľná s inými krajinami EÚ, no využívanie vysokovýkonných výpočtov vo verejnom a súkromnom sektore bude zrejme výraznejšie zaostávať.

Snaha angažovať a motivovať malé a stredné podniky a firmy z priemyslu, aby začali využívať HPC+ nástroje zostáva výzvou vo väčšine krajín EÚ. Jednou z dôležitých úloh pre slovenské NCC je preto propagácia a zvyšovanie povedomia o vysokovýkonnom počítaní jednak medzi potenciálnymi používateľmi, ale aj u širšej verejnosti. Zapojením sa do popularizačných aktivít, účasťou na konferenciách, ale aj využívaním sociálnych médií kompetenčné centrum ukazuje možnosti využitia HPC nielen vo vede, ale aj v priemyselnej výrobe, vývoji a výskume.

Je pravda, že HPC je u nás vnímané skôr ako doména akademických výskumných tímov a slovenské podniky, podobne ako tie v zahraničí, musia pri migrácii na tieto riešenia prekonávať bariéry: nedostatok vedomostí a skúseností, obmedzený prístup k infraštruktúre. Národné kompetenčné centrá v celej Európe

Odborníci z NCC budú poskytovať bezplatné poradenstvo a konzultácie, prípadne kontakt na expertov v zahraničí.

budú pomáhať tieto bariéry prekonávať, napĺňajúc tak európsku víziu podpory informatizácie, digitalizácie a inovácií. V praxi to znamená, že odborníci z NCC budú poskytovať bezplatné poradenstvo a konzultácie, prípadne kontakt na expertov v zahraničí.

Pomôžu tiež s výberom optimálnych riešení, efektívnym nastavením aplikácií a s realizáciou pilotných alebo tzv. proof-of-concept projektov. V súčasnosti slovenské NCC spolupracuje so 4 subjektami zo súkromného sektora.

Okrem zvyšovania kompetencií v rámci HPC komunity Kompetenčné centrum kladie dôraz aj na ďalšie vzdelávanie svojich odborníkov. S podporou projektu Castiel CSA sa členovia EuroCC projektu zúčastňujú školení a workshopov a pripravujú aj intenzívnejšiu výmenu vedomostí a skúseností s inými kompetenčnými centrami.

Z globálneho hľadiska projekt EuroCC iste zohrá významnú rolu v rozvoji HPC kompetencií na Slovensku aj v Európe, napomôže prenosu vedomostí a skúseností z vyspelejších krajín a podpore inovácií, a tak prispeje k naplneniu ambície Európskej únie – stať sa svetovým lídrom v oblasti superpočítačov a vysokovýkonného počítania.

A čo je cieľom na národnej úrovni?

Nadalej poskytovať kvalitné služby a podporu všetkým používateľom a záujemcom a ukotviť Národné kompetenčné centrum pre HPC ako primárny kontaktný bod a vstupnú bránu do slovenskej aj európskej HPC komunity.



NÁKUP NOVEJ HPC INFRAŠTRUKTÚRY



Po ukončení projektu SIVVP (Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie) Centrum spoločných činností vníma aktuálnu potrebu rozvoja HPC infraštruktúry na Slovensku. Vychádzajúc z požiadaviek používateľov, svojich doterajších skúseností s prevádzkou a súčasných možností HPC systémov v kontexte svetového vývoja, CSČ v rokoch 2019 – 2020 pripravilo žiadosť o nenávratný finančný príspevok v rámci výzvy Operačného programu Integrovaná infraštruktúra: OPII-2020/7/55-NP. *Projekt Národné kompetenčné centrum pre vysokovýkonné počítanie* (kód 311071AKF2) patril medzi úspešné a už v decembri 2020 sa rozbehli podporné aktivity.

Cieľom projektu je, v súlade s prioritami definovanými v Digitálnej stratégii Slovenska, podpora rôznych sektorov podnikania na Slovensku s dôrazom na malé a stredné podniky a zvyšovanie ich inovačného potenciálu vytvorením platformy na efektívnu adopciu a využívanie HPC+ technológií. *Prostriedky zo Štrukturálnych fondov EU* sa použijú na technické zabezpečenie Národného kompetenčného centra, teda na nákup HPC systému.

Nový HPC systém počíta s niekoľkonásobným navýšením aktuálneho výpočtového výkonu. Ten bude aj vzhľadom na rastúci dopyt po AI/ML technológiách diverzifikovaný na klasickú CPU časť a časť posilnenú o GPGPU akcelerátory. Superpočítač ako celok bude postavený modulárne (s flexibilitou budúceho rozšírenia) za použitia najnovších technológií z oblasti HPC hardvéru a sietí. Samozrejme nebude chýbať ani centralizovaná správa a monitoring prevádzky systému. CSČ tiež plánuje spustiť do prevádzky aj nové služby na zjednodušenie prístupu používateľov (On-Demand) ako aj samotného používania (OpenStack, Singularity, ...) výpočtových zdrojov superpočítača.

Centrum spoločných činností SAV, momentálne v úzkej spolupráci s Ministerstvom investícií, regionálneho rozvoja a informatizácie ako sprostredkovateľským orgánom, už v júli 2021 spustilo verejné obstarávanie. Celková doba realizácie aktivít projektu vrátane podporných aktivít je 32 mesiacov. Nové výpočtové kapacity by mali byť sprístupnené používateľom v prvej polovici roka 2022.

EUROHPC JU

PANEURÓPSKA HPC

INFRAŠTRUKTÚRA



Spoločný európsky podnik pre vysokovýkonné výpočty – EuroHPC JU (European High Performance Computing Joint Undertaking) je spoločná iniciatíva Európskej únie, európskych krajín a partnerov zo súkromného sektora, ktorej cieľom je vybudovať európsky HPC ekosystém na svetovej úrovni. Slovensko je členom EuroHPC JU od roku 2019. Dnes táto organizácia združuje 33 európskych krajín, Európsku úniu (ktorú v EuroHPC zastupuje Európska komisia) a dvoch súkromných partnerov (ETP4HPC a BDVA).

EuroHPC JU umožňuje skoordinať postup Európskej únie a členských krajín a využiť spoločné kapitálové a ľudské zdroje na vybudovanie európskej exascale HPC infraštruktúry (s výkonom viac ako 10^{18} operácií za sekundu), ako aj vyvíjať inovatívne superpočítačové technológie a aplikácie. JU podporuje snahu o technologickú a digitálnu autonómiu Európy a jej ambície stať sa svetovým lídrom v HPC oblasti. Samozrejmosťou je podpora špičkového vedeckého výskumu a konkurencieschopnosti európskeho priemyslu a technológií.

Z používateľského hľadiska sú zaujímavé najmä informácie o nových európskych superpočítačoch, keďže EuroHPC JU umožňuje akademickým aj súkromným záujemcom požiadať o prístup k výpočtovým prostriedkom. Momentálne sa obstaráva a inštaluje 7 z 8 naplánovaných projektov (5 petascale, 3 pre-exascale), ktoré by mali byť postupne sprevádzkované do konca mája 2022:

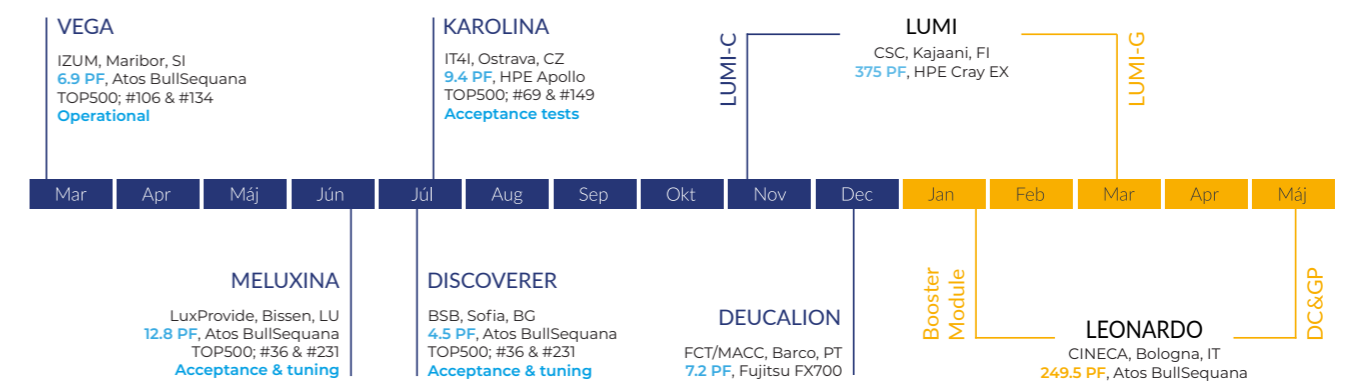
HARMONOGRAM ZAVÁDZANIA EUROHPC SYSTÉMOV



EuroHPC
Joint Undertaking

2021

2022



Na nasledujúcich stranách je uvedený **Prehľad európskych HPC systémov** a detailnejšie informácie.

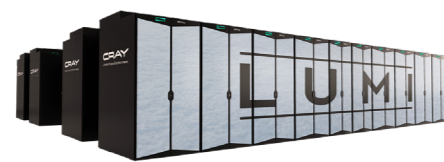
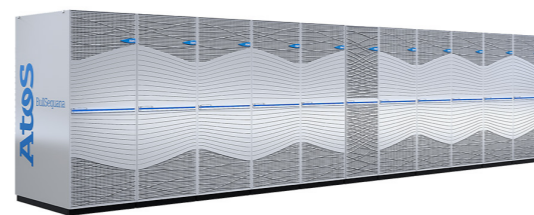


Illustration of the HPE Cray EX cabinets
© Hewlett Packard Enterprise

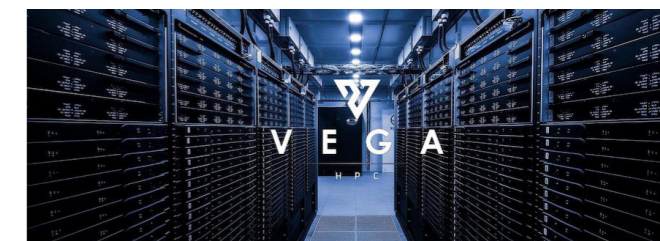
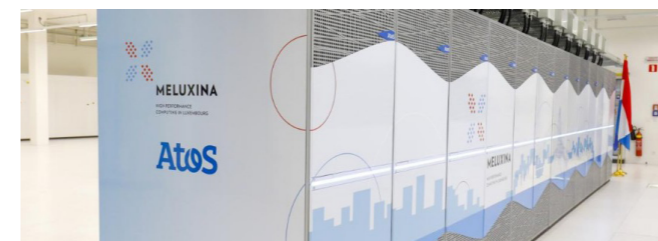


© Atos

LUMI

LEONARDO

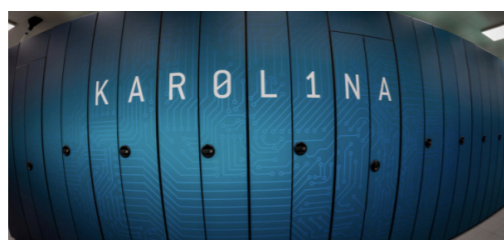
TECHNOLÓGIA	Superpočítač LUMI bude založený na technológii Cray EX od spoločnosti Hewlett Packard Enterprise a lokalizovaný v Kajaani, Fínsko.	Superpočítač LEONARDO od spoločnosti ATOS bude postavený na technológii BullSequana XH2000 a lokalizovaný v Talianskej Boloni.
UDRŽATEĽNÝ VÝKON	375 petaflops	249,4 petaflops
MAXIMÁLNY VÝKON	552 petaflops	322,6 petaflops
VÝPOČTOVÉ MODULY	<ul style="list-style-type: none"> ▶ GPU modul (LUMI-G) ▶ x86 CPU-modul (LUMI-C) ▶ modul pre dátovú analytiku (LUMI-D) ▶ modul pre kontajnerové a cloudové služby (LUMI-K) 	<ul style="list-style-type: none"> ▶ Hybridný CPU-GPU booster modul s výkonom 240 Pflops ▶ Datacentrický modul s výkonom 9 Pflops, rýchlou pamäťou generácie DDR5 a lokálnymi NVMe SSD pre dátovú analytiku
CENTRÁLNY PROCESOR (CPU)	64-jadrové procesory najnovšej generácie AMD EPYC™ (LUMI-C modul)	Intel procesory generácie Ice-Lake (Booster modul) a Sapphire Rapids (Datacentrický modul)
GRAFICKÝ PROCESOR (GPU):	Pripravované GPU najnovšej generácie AMD Instinct™ (LUMI-G modul)	Grafické akcelerátory architektúry NVIDIA Ampere, poskytujúce celkový výpočtový výkon 10 Eflops (v presnosti FP16 pre úlohy typu Tensor Flow AI)
DÁTOVÉ ÚLOŽISKO	Celkovo bude mať úložisko superpočítača LUMI 117 PB a maximálnu šírku pásma I/O 2 TB za sekundu.	Superpočítač LEONARDO bude vybavený viac ako 100 PB najmodernejšej úložnej kapacity a 5 PB vysokovýkonného úložiska.
APLIKAČNÉ OBLASTI	Systém LUMI bol navrhnutý na riešenie problémov z oblasti umelej inteligencie (najmä hlboké učenie) a tradičné veľkoškálové simulácie v kombinácii s rozsiahlou analýzou dát pri riešení jedného výskumného problému.	LEONARDO je zameraný na modulárnosť, škálovateľnosť a efektívne riešenie problémov z oblastí: analýza dát, vizualizácia a interaktívne výpočty, urgentné a cloudové výpočty.



MELUXINA

VEGA

System MeluXina bude dodávaný spoločnosťou Atos a jeho technologická platforma bude BullSequana XH2000. Lokalizovaný bude v mestečku Bissen v Luxembursku.	Superpočítač Vega v Slovinskom Maribore má rovnakého dodávateľa ako predošlé 2 systémy teda ATOS a postavený je na rovnakej technológii BullSequana XH2000.
12 petaflops	6,9 petaflops
18 petaflops	10,1 petaflops
<ul style="list-style-type: none"> ▶ Cluster modul s očakávaným udržateľným výkonom 2 Pflops ▶ Accelerator-GPU a Accelerator-FPGA moduly s udržateľným celkovým výkonom 10 Pflops (a výkonom pre aplikácie z oblasti umelej inteligencie až 500 Pflops) ▶ RAM modul s veľkou kapacitou operačnej pamäte 	<ul style="list-style-type: none"> ▶ CPU modul pozostávajúci z 960 uzlov, 256GB RAM/uzol, 20% uzlov s dvojnásobnou kapacitou RAM a výpočtovou sieťou infiniband postavenou na technológii HDR100 ▶ GPU modul pozostávajúci zo 60 uzlovprepojených výpočtovou sieťou infiniband postavenou na technológii HDR200
Procesory najnovšej generácie AMD EPYC™	64 jadrové procesory najnovšej generácie AMD EPYC™ 7H12 (celkovo 1920 procesorov)
Grafické akcelerátory architektúry NVIDIA Ampere, A100	Grafické akcelerátory architektúry NVIDIA Ampere, A100 (celkovo 240 akcelerátorov)
Superpočítač má viacúrovňové 20 PB úložisko s rýchlosťou 400 GB/s flashovou časťou na dočasné dáta a 5 PB páskovú knižnicu.	Dátové úložisko systému VEGA pozostáva z vysokovýkonnej časti so súborovým systémom typu Lustre (1 PB) a veľkokapacitnej časti typu Ceph (23 PB).
Aplikačné oblasti systému Meluxina zahŕňajú tradičné HPC výpočty, umelú inteligenciu, big data a dátovú analytiku.	Superpočítač Vega bol navrhnutý na tradičné HPC výpočty, umelú inteligenciu, big data, dátovú analytiku a veľkoškálové spracovanie dát.



© Fujitsu

KAROLINA

DISCOVERER

DECAULION

TECHNOLÓGIA

Karolina od dodávateľa Hewlett Packard Enterprise, používa hardvérovú technológiu HPE Apollo 2000Gen10 Plus a HPE Apollo 6500. Superpočítač je umiestnený v IT4I centre v Ostrave (Česká Republika).

Superpočítač Discoverer od ATOS-u bude pozostávať z uzlov typu BullSequana XH2000 a postavený bude v technologickom parku v Sofii (Bulharsko).

Systém Deucalion od spoločnosti Fujitsu bude kombinovať technológie BullSequana XH2000 (ATOS) a PRIMEHPC (Fujitsu, ARM). Lokalizovaný bude v Portugalskom meste Braga.

UDRŽATEĽNÝ VÝKON

9,13 petaflops

4,44 petaflops

7,22 petaflops

MAXIMÁLNY VÝKON

15,2 petaflops

6 petaflops

10 petaflops

VÝPOČTOVÉ MODULY

- ▶ Univerzálny modul na štandardné numerické simulácie (720 uzlov, 3,8 PFlops)
- ▶ Akcelerovaný modul (70 uzlov, každý osadený 8 GPU akcelerátormi, 11 PFlops pre štandardné simulácie a 150 PFlops pre úlohy z oblasti umelej inteligencie)
- ▶ Modul určený na spracovávanie veľkých dátových setov (24 TB RAM, 74 TFlops)
- ▶ Modul pre cloudové služby (36 uzlov, 131 TFlops)

- ▶ Jeden univerzálny výpočtový modul pozostávajúci z 1128 uzlov

- ▶ Cluster modul s očakávaným udržateľným výkonom 2 Pflops
- ▶ Accelerator-GPU a Accelerator-FPGA moduly s udržateľným celkovým výkonom 10 Pflops (a výkonom pre aplikácie z oblasti umelej inteligencie až 500 Pflops)
- ▶ RAM modul s veľkou kapacitou operačnej pamäte

CENTRÁLNY PROCESOR (CPU)

Viac ako 100,000 CPU jadier a 250 TB operačnej pamäte.

64 jadrové procesory najnovšej generácie AMD EPYC™ 7H12 (2.6GHz, 280W).

A64FX (ARM modul), AMD EPYC™ (x86 modul).

GRAFICKÝ PROCESOR (GPU):

Grafické akcelerátory architektúry NVIDIA Ampere, A100 s celkovým počtom viac ako 3,8 miliónov CUDA jadier / 240,000 tenzorových jadier a 22,4 TB rýchlej HBM2 pamäte.

Žiadny.

Grafické akcelerátory architektúry NVIDIA Ampere, A100.

DÁTOVÉ ÚLOŽISKO

Viac ako 1 PB dostupného úložného priestoru s rýchlosťou 1 TB/s.

2 PB dostupného úložného priestoru.

430 TB vysokorýchlostná časť s úložnými jednotkami typu NVMe a 10,6 PB vysokorýchlostná časť s paralelným súborovým systémom.

APLIKAČNÉ OBLASTI

Aplikačné oblasti systému Karolina zahŕňajú tradičné HPC výpočty, umelú inteligenciu, big data a dátovú analytiku.

Konzervatívny systém navrhnutý najmä pre úlohy z oblasti tradičných HPC simulácií.

Aplikačné oblasti zahŕňajú tradičné HPC výpočty, umelú inteligenciu, big data a dátovú analytiku.

Prístup a možnosť realizovať svoje výpočty na systémoch vybudovaných v spolupráci s EuroHPC JU budú mať všetci európski používatelia nielen z akademických inštitúcií, ale aj súkromné firmy. Jednotlivé kategórie prístupu vychádzajú zo systému a alokačných politík organizácie PRACE a sú nastavené podľa parametrov ako objem ponúkaných výpočtových prostriedkov, komplexnosť hodnotenia žiadostí, typ aplikácií a podľa periodicity termínov na podávanie žiadostí. Špecifické detaily budú zverejnené samostatne s každou výzvou, no typické kategórie a parametre sú uvedené v tabuľke Kategórie prístupu na nasledujúcej dvojstrane.

Prístup a možnosť realizovať svoje výpočty na systémoch vybudovaných v spolupráci s EuroHPC JU budú mať všetci európski používatelia nielen z akademických inštitúcií, ale aj súkromné firmy.

V jednej výzve budú k dispozícii výpočtové prostriedky viacerých HPC centier a superpočítačov, čo je z hľadiska manažmentu výziev ekonomickejšie a zároveň poskytuje priestor na maximalizáciu objemu alokácií. EuroHPC JU bude zverejňovať výzvy v šiestich kategóriách:

- ▶ Extreme Scale Access
- ▶ Regular Access
- ▶ Benchmark Access
- ▶ Development Access
- ▶ Fast Track Access for Academia
- ▶ Fast Track Access for Industry

O aktuálnych výzvach pravidelne informujeme na webstránke [Národného kompetenčného centra pre HPC](#) a v [Newsletteri](#) pre zaregistrovaných používateľov.



KATEGÓRIE PRÍSTUPU

VÝZVA	EXTREME SCALE	REGULAR	BENCHMARK	DEVELOPMENT	FAST TRACK ACADEMIA	FAST TRACK INDUSTRY
TRVANIE	1 rok, predĺžiteľný	1 rok, predĺžiteľný	2 – 3 mesiace	1 rok, predĺžiteľný	< 6 mesiacov	1 rok, predĺžiteľný
PERIODICITA	Priebežná výzva, uzávierka každé 2 roky	Priebežná výzva, uzávierka každé 4 mesiace	Priebežná výzva, uzávierka každý mesiac	Priebežná výzva, uzávierka každý mesiac	Priebežná výzva, uzávierka každé 2 týždne alebo mesiac	Priebežná výzva, uzávierka každé 2 týždne alebo mesiac
DÁTA	Úložisko pre veľké objemy dát na strednú až dlhú dobu	Úložisko pre veľké objemy dát na strednú až dlhú dobu	Úložisko pre dáta s limitovaným objemom	Platforma na spracovanie dát		
PRÍSTUP PRE PRIEMYSELNÉ PODNIKY?	Áno – pre otvorený výskum a vývoj so špecifickými hodnotiacimi kritériami	Áno – pre otvorený výskum a vývoj za špecifických podmienok	Áno – pre otvorený výskum a vývoj	Áno – pre otvorený výskum a vývoj	Nie	Áno – exkluzívne pre otvorený výskum a vývoj
ŽIADOSTI						
EXTERNÉ PEER-REVIEW	Áno	Áno	Nie	Nie	Nie / Vopred identifikované	Nie / Vopred identifikované
TECHNICKÉ POSUDZOVANIE	Áno	Áno	Áno	Áno	Áno	Áno
DRUH ŽIADOSTI	Kompletná žiadosť	Kompletná žiadosť	Technická žiadosť	Technická žiadosť	Skrátená žiadosť + podporné dokumenty	Kompletná žiadosť
PLÁN MANAŽMENTU DÁT	Áno	Áno	Áno	Áno	Áno	Áno

Malé a stredné podniky a firmy z priemyslu môžu požiadať o prístup k výpočtovým prostriedkom vo všetkých kategóriách týchto výziev, alebo môžu využiť komerčné služby poskytované EuroHPC JU. Podmienkou poskytovania komerčného prístupu je jeho využitie výlučne na civilné aplikácie.

02

APLIKÁCIE V PRAXI

hpc focus

Skupina profesora **IVANA ŠTICHA**

**SUPERPOČÍTAČOVÉ
MODELOVANIE
NA NANOŠKÁLE**

**Prof. Ing.
Ivan Štich, DrSc.
pôsobí vo
Fyzikálnom
ústave Slovenskej
akadémie vied.**

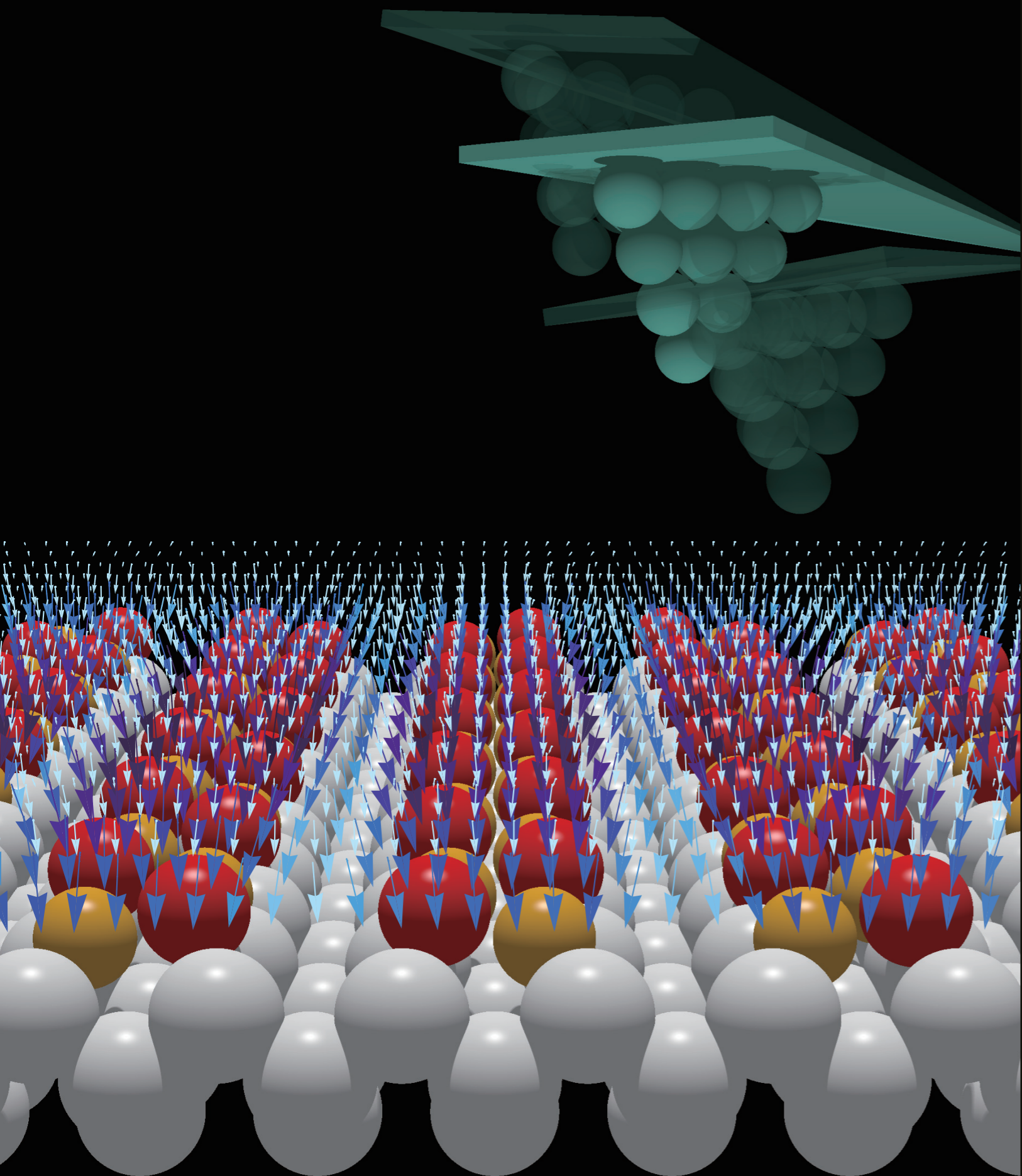
Skupina prof. Šticha (prof. Ivan Štich, Dr. Ján Brndiar, Dr. Róbert Turanský, Dr. Kamil Tokár, a do mája 2018 aj Dr. René Derian) na Fyzikálnom ústave SAV sa dlhodobo venuje modelovaniu kondenzovaných systémov (3D kryštály, povrchy, 2D systémy, molekuly) superpočítačovými simuláciami na atomárnej úrovni. Na atomárnej úrovni je správanie systémov určené kvantovou mechanikou, t.j. Schrödingerovou, resp. Diracovou rovnicou, ktoré superpočítačové modelovanie rieši typicky pre systémy pozostávajúce zo stoviek atómov a stoviek až tisícov elektrónov. Tieto výpočty sú obvykle numericky mimoriadne náročné. Pre ilustráciu je možné uviesť výpočet šírky zakázaného pasu 2D fosforénu ultra presnými stochastickými metódami kvantového Monte Carla, vid' nižšie, na ktorý by sme, ak by sme tento výpočet prevádzali na slovenskom superpočítači Aurel, potrebovali približne jeho ročnú kapacitu. Skupina prof. Šticha v posledných rokoch toto modelovanie prevádzala najmä ako prostriedok na interpretáciu, resp. verifikáciu laboratórnych meraní a to v spolupráci s európskymi pracoviskami, napr. s Univerzitou v Regensburgu a Univerzitou v Giessen a pracoviskami v Japonsku, konkrétne univerzitou v Osake a s North Carolina State Univerzitou v U.S.A. Niekoľko nedávnych výstupov tohto modelovania sa pokúsime priblížiť.



01 **Spolupráca s prof. Sugawarom
a s prof. Li**
Univerzita v Osake

So skupinou prof. Sugawaru na Univerzite v Osake spolupracujeme na projekte bezkontaktnéj atomárnej silovej mikroskopie (AFM). AFM je experimentálna metóda, ktorá umožňuje zobrazovanie povrchov tuhých látok s atomárnou, v ojedinelých prípadoch subatomárnou, rozlišovacou schopnosťou, nanomanipuláciu atómov a molekúl na povrchoch a ktorá v niektorých prípadoch má aj chemickú rozlišovaciu schopnosť, t.j. umožňuje z meraní určiť aký druh atómu sa nachádza pod hrotom mikroskopu. Všetky tieto schopnosti AFM metóda odvodzuje od sily pôsobiacej medzi hrotom mikroskopu a vzorkou. Numerické simulácie AFM experimentov obvykle umožňujú odhad apexu hrotu, t.j. atómu, ktorým je hrot ukončený a ktorý povrch mapuje s atomárnou rozlišovacou schopnosťou alebo odhad vzdialenosti apexu hrotu od povrchu vzorky, ktoré oboje nie je možné určiť priamo len z experimentov.

**Fotografia
skupiny CCMS
na FÚ SAV:
prof. Štich,
Dr. Brndiar,
Dr. Turanský,
Dr. Derian
a Dr. Tokár.**



V roku 2017 sme v spolupráci o skupinou v Osake po prvýkrát ukázali ako je možné pomocou AFM metód zmerať vektorové veličiny akými sú napr. sily pôsobiace medzi hrotom AFM mikroskopu a vzorkou, dipólové alebo magnetické momenty, ktoré sa doposiaľ obvykle aproximovali z-tovou zložkou vektorovej veličiny. Príkladom je vektorové pole síl nad dimérmí germánia na povrchu Ge(001) $c(4 \times 2)$ zmerané v ultra vysokom vákuu pri teplotách kvapalného dusíku, viď obrázok vľavo [1]. Túto mapu síl sme numericky modelovali a zistili, že sily z nášho modelu sú o rád väčšie ako sily experimentálne zmerané. Tento nesúlad nebolo možné vysvetliť chybou modelu, a tak sa previedla nová analýza experimentálnych dát a ich konverzie na vektorovú mapu. Výsledkom bolo zistenie, že v procese transformácie experimentálnych dát došlo k chybe, ktorej výsledkom bolo, že odhad vzdialenosti hrot-vzorka, bol zhruba o 1 \AA ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) väčší ako v skutočnosti, ktorý spôsobil, že modelované sily boli približne $10\times$ väčšie ako tie experimentálne merané. Po korekcii vzdialenosti bol súlad modelu s experimentom na kvantitatívnej úrovni. Ďalším dôsledkom tohto nesúladu bolo, že sme vypracovali metódu, pomocou ktorej je po prvýkrát možné z vektorovej mapy priamo určiť vzdialenosť apexu hrotu od vzorky, t.j. jednej z veličín, ktorú doposiaľ nebolo možné určiť priamo z experimentálnych výsledkov. V širšom kontexte predpokladáme, že znalosť rozloženia síl nad povrchom na atomárnej škále, vertikálnych ako aj laterálnych, otvorí nové okno na pochopenie morfológie povrchov, ich chemické zloženie a reakcie na povrchoch, skúmanie nanoštruktúr pomocou atomárnej a molekulárnej manipulácie a porozumenie správania sa nano-strojov na povrchoch.

02

Spolupráca s prof. Schirmeisenom

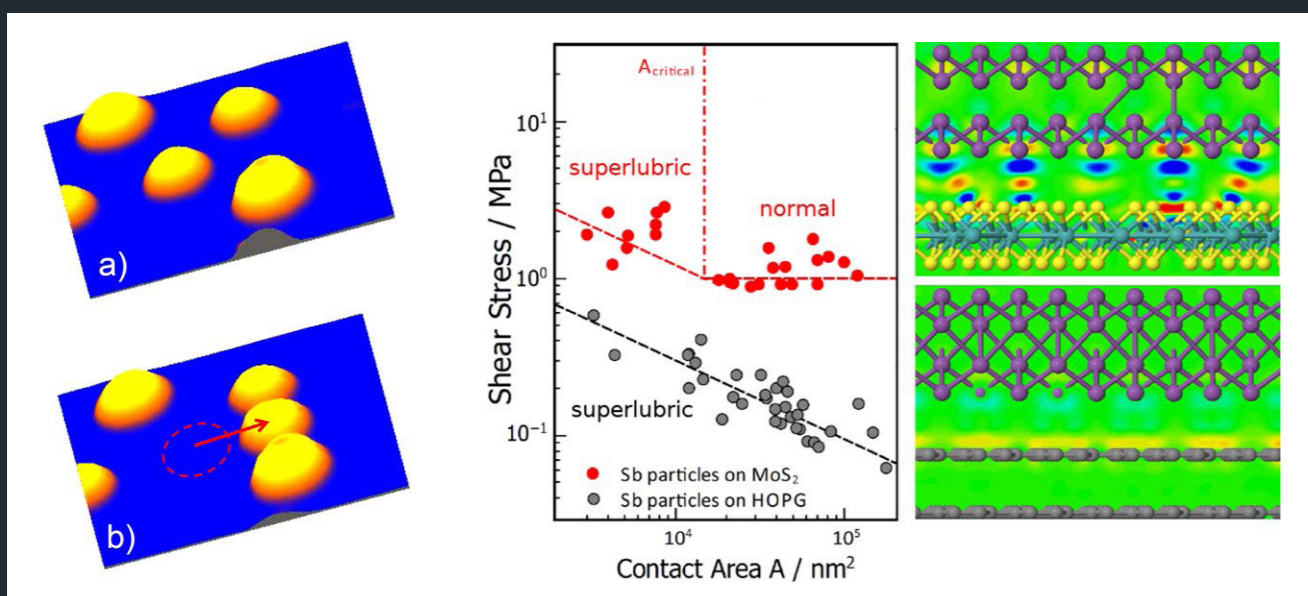
Univerzita v Giessen, SRN

Ďalším príkladom ako numerické simulácie môžu pomôcť porozumeniu a interpretácii experimentov, tentokrát AFM v tzv. kontaktnom móde, je projekt nantribológie, t.j. trenia na nanoškále, na ktorom sme spolupracovali so skupinou prof. Schirmeisena na Univerzite v Giessen, SRN. Na rozdiel od makrosvetu, kde povrchy v kontakte vždy vykazujú trenie, v nanosvete je za určitých podmienok možné realizovať stavy, v ktorých sa povrchy nanočastíc môžu po sebe kĺzať bez merateľného

Skupina prof. Šticha (prof. Ivan Štich, Dr. Ján Brndiar, Dr. Róbert Turanský, Dr. Kamil Tokár, a do mája 2018 aj Dr. René Derian) na Fyzikálnom ústave SAV sa dlhodobo venuje modelovaniu kondenzovaných systémov (3D kryštály, povrchy, 2D systémy, molekuly) superpočítačovými simuláciami na atomárnej úrovni.

trenia a vykazovať tzv. superlubricitu [2]. Zjednodušene, teória superlubricity vysvetľuje jav pomocou nekomenzurabilných povrchov, ktoré, z dôvodu rôznych mriežkových konštánt nanočastice a substrátu, resp. nekomenzurabilnou orientáciou nanočastice a substrátu nezapadajú „do registra“. Nakoľko väčšina kombinácií materiálov má rôzne mriežkové konštanty, superlubricita by mala byť bežný stav, čo odporuje realite.

Na pochopenie za akých podmienok sa môže v nanosvete realizovať stav superlubricity sme porovnávali trenie masívnych nanočastíc antimónu na grafitu (HOPG) a MoS₂ v ultra vysokom vákuu, pričom obidva povrchy sú si podobné a sú tzv. „mazadlá“. Výsledky na obrázku nižšie ukazujú, že tieto dva systémy vskutku vykazujú úplne odlišné tribologické vlastnosti.



Ako ukazuje obrázok, všetky nanočastice antimónu na HOPG vykazujú superlubricitu, zatiaľ čo na MoS₂ superlubrické správanie vykazujú len menšie nanočastice a väčšie vykazujú normálne trenie. Ukázali sme, že toto správanie súvisí s emisiou dislokácií na nanokontakte Sb/MoS₂, ktorá absentuje na kontakte Sb/HOPG. Výsledkom je, že nanokontakt Sb/MoS₂ je pre väčšie nanočastice lokálne „v registri“ a Sb/HOPG nie je. Okrem toho, ako ukazujú spočítané nábojové hustoty na obrázku vyššie, obidva nanokontakty majú aj úplne odlišné chemické vlastnosti, ktoré tiež prispievajú k vyššej miere trenia na nanokontakte Sb/MoS₂ v porovnaní s nanokontaktom Sb/HOPG.

Naša štúdia bola prvou ukážkou ako vlastnosti nanokontaktov ovplyvňujú tribologické vlastnosti na nanoškále. Je zrejmé, že rovnaké kritéria pre superlubricitu platia aj v iných systémoch, čo je tiež jedna z príčin, prečo superlubricita predstavuje skôr výnimočné ako bežné správanie. Je tiež zrejmé, že poznanie superlubricity na nanoškále je nutnou podmienkou pre praktické využitie tohto javu.

03

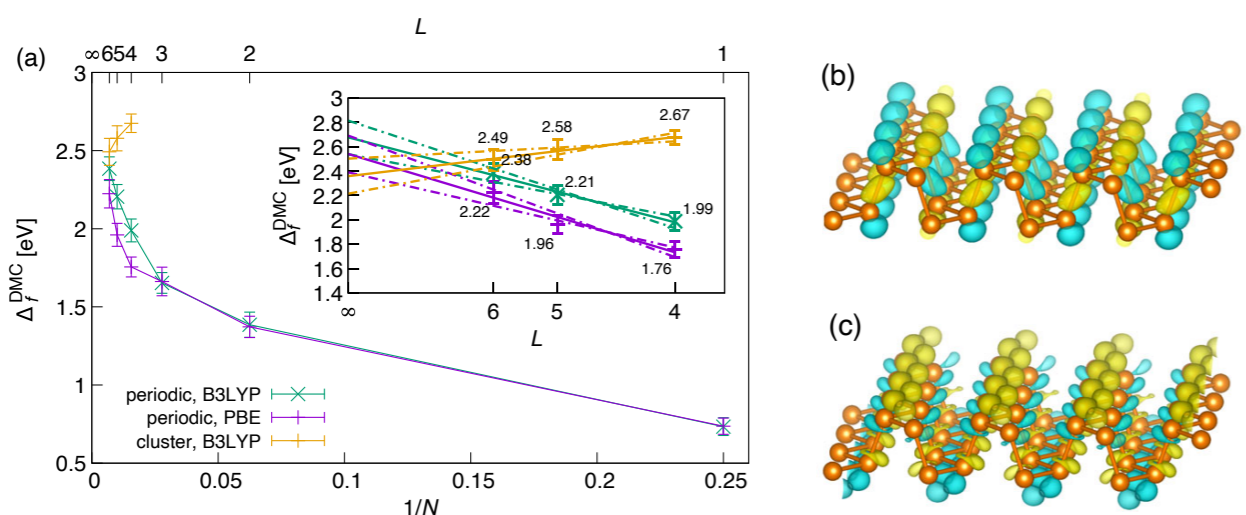
Spolupráca s prof. Fabianom a prof. Mitasom

Univerzita v Regensburgu
North Carolina State Univerzity

Tretím príkladom nášho súčasného výskumu sú elektronické a fotonické vlastnosti 2D materiálov. Po udelení Nobelovej ceny za fyziku v r. 2010 Geimovi a Novoselovovi za objav unikátnych vlastností grafénu (2D analóg grafitu), sú momentálne 2D materiály jednou z najhorúcejších tém. Elektronické vlastnosti 2D materiálov siahajú od kovových vrstiev paládia a ródia, cez polokovový grafén, polovodiče s rôznou šírkou zakázaného pásu, ako napr. silicén, fosforén a dichalkogenidy prechodových kovov až po izolant h-BN, pričom aplikácie najdôležitejšie sú 2D materiály, ktoré vykazujú zakázaný pás energií. Šírky zakázaných pásov, ktoré sú kľúčové pre aplikácie v elektronike je možné ďalej ovplyvňovať počtom vrstiev, ťahom, chemickými prísadami a uložením do dielektrického prostredia substrátu a krycej vrstvy. Ukazuje sa však, že napr. zmerať s dostatočnou presnosťou šírky zakázaných pásov týchto 2D materiálov je technický problém. Napr. pre polovodič s priamym prechodom, jednovrstvový fosforén, dávajú fotoluminiscenčné spektrá šírku optického zakázaného pásu od 1.3 do 2.1 eV, t.j. s neakceptovateľným rozptylom ≈ 0.8 eV. Tento rozptyl pokrýva spektrum od infračerveného po zelené svetlo! Vedci a inžinieri by určite chceli vedieť, či je fosforén možné použiť ako materiál pre LEDky žiariace červeným, žltým, zeleným alebo modrým svetlom. Podobný experimentálny rozptyl je pritom charakteristický aj pre ďalšie 2D materiály. V tejto situácii je prirodzené očakávať, že referenčnú šírku zakázaného pásu jednoducho získame výpočtom. Žiaľ, ukazuje sa, že aj numerické metódy (napr. DFT alebo GW metódy) vykazujú podobný rozptyl. Rozhodli sme sa preto, v spolupráci s prof. Fabianom z Univerzi-

Po udelení Nobelovej ceny za fyziku v roku 2010 Geimovi a Novoselovovi za objav unikátnych vlastností grafénu (2D analóg grafitu), sú momentálne 2D materiály jednou z najhorúcejších tém.

ty v Regensburgu a prof. Mitasom z North Carolina State Univerzity, pre úplne inú paradigmu modelovania a presnosti a šírku zakázaného pásu jednovrstvového fosforénu sme spočítali mnohočasticovými stochastickými metódami kvantového Monte Carla [3].



Metódy kvantového Monte Carla patria k tým najpresnejším metódam na výpočet elektrónovej štruktúry. Šírku zakázaného pásu sme určili z rozdielu mnohočasticových energií základného stavu (HOMO, panel b) v obrázku vyššie) a prvého excitovaného stavu (LUMO, panel c). Výsledky, na obrázku vyššie, ktorý súčasne ukazuje škálovanie do termodynamickej limity (limita nekonečne veľkého systému). Z tohto obrázku je tiež zrejmé, že pre dostatočne veľké systémy je škálovanie lineárne v $1/N$, kde N je počet atómov resp. elektrónov v systéme. Výpočet sme previedli pre klastrové (žltá farba) aj periodické aproximanty (fialová a zelená farba, ktoré zodpovedajú dvom rôznym prípravám tzv. nodálnych hyperplôch, t.j. plôch, kde je hodnota vlnovej funkcie nulová). Extrapolovaná energia zakázaného pásu (tzv. quasi-particle band gap) je $\approx 2.4\text{eV}$, t.j. na hornej hranici experimentálnych odhadov. Táto spočítaná hodnota je zrejme najpresnejším odhadom šírky zakázaného pásu v 2D materiáli a predstavuje zrejme unikátny prípad, kedy je spočítaná hodnota presnejšia ako experimentálne nameraná. Opačnou stranou mince je cena za toto číslo. Na spočítanie energií na obrázku vyššie sme potrebovali asi 30 miliónov core hours, čo predstavuje zhruba ročný numerický výkon slovenského superpočítača AUREL

a ukazuje, že cena poznania je vždy vysoká. Táto cena je však vyvážená ultimátnym poznaním a porozumením a vnesením svetla do presnosti experimentálnych meraní a teoretických metód. Tento výpočtový model v súčasnosti aplikujeme aj na ďalšie 2D materiály a 2D materiály pod vplyvom ťahu.

Na spočítanie energií na obrázku vľavo (a) sme potrebovali asi 30 miliónov core hours, čo predstavuje zhruba ročný numerický výkon slovenského superpočítača AUREL a ukazuje, že cena poznania je vždy vysoká.

- [1] Y. Naitoh, R. Turanský, J. Brndiar, Y.J. Li, I. Štich, and Y. Sugawara. *Subatomic-scale force vector mapping above a Ge(001) dimer using bimodal atomic force microscopy*, *Nat. Phys.* 13, 663 (2017).
- [2] D. Dietzel, J. Brndiar, I. Štich, and A. Schirmeisen. *Limitations of Structural Superlubricity: Chemical Bonds versus Contact Size*, *ACS Nano* 11, 7642 (2017).
- [3] T. Frank, R. Derian, K. Tokar, L. Mitas, J. Fabian, I. Štich. *Many-body quantum Monte Carlo study of 2D materials: cohesion and band gap in single-layer phosphorene*, *Phys. Rev. X* 9, 011018 (2019).

**CENA VÝPOČTOVÉHO ČASU
NA SUPERPOČÍTAČI
JE VYVÁŽENÁ ULTIMÁTNYM
POZNANÍM A POROZUMENÍM.**



UŽITOČNÉ ÍLY A HPC

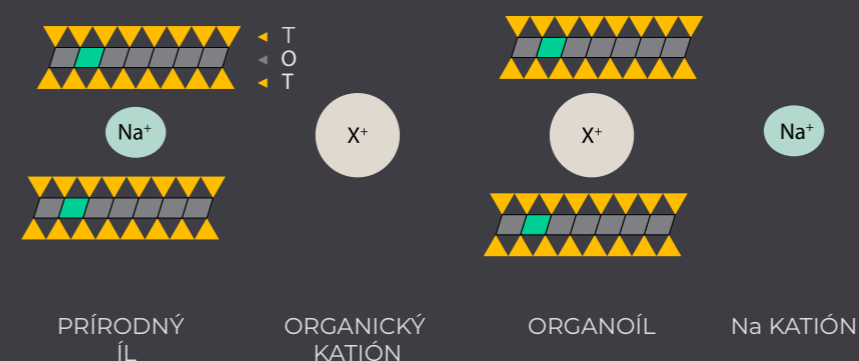
Eva
Scholtzová

Íly sú prítomné všade okolo nás. Ľudia odpradávaňa využívajú tento mimoriadne užitočný materiál v každodennom živote. Ich existenciu často nevnímame a ani si neuvedomujeme ich prítomnosť, či ich funkčnosť. Napr. kozmetické prípravky, zubná pasta, pracie ako aj čistiace prášky, keramika, či už šálky, taniere, sanita, alebo tehly a obklady, vydláždené chodníky, ako aj kvalitný papier, bieliace hlinky pre minerálne oleje, tu všade sú íly prítomné. Majú tiež využitie v ďalších odvetviach hospodárstva ako sú stavebníctvo, chemický priemysel (katalyzátory, nosiče hnojív, plnivá farieb, žiaruvzdorné materiály, adsorpčné činidlá). Kvalita pôdy je tiež určovaná aj prítomnosťou ílov, ktoré stanovujú jej správne využitie.

V posledných rokoch sa íly radia do kategórie surovín priamo chrániacich životné prostredie. Vďaka schopnosti napučiavať, teda hydratovať, a zároveň viazať organické látky v medzivrství, sú íly schopné zneškodňovať a imobilizovať toxické látky, ako aj zabraňovať šíreniu nežiadúcich látok v prostredí (skládky odpadov). Ílové minerály, napr. montmorillonit, či kaolinit, ako aj hybridné materiály na ich báze nachádzajú čoraz väčšie uplatnenie v priemysle a vývoji nových pokročilých materiálov

s presne definovanými fyzikálnochemickými vlastnosťami. Sú typické vrstevnatou štruktúrou, v ktorej sú navzájom prepojené siete tetraédrov (T) a oktaédrov (O) do vrstiev, či už spôsobom T-O alebo T-O-T. Ílové minerály majú v medzivrství anorganické kationy, častokrát hydratované, ktoré kompenzujú náboj vrstiev spôsobený izomorfnou substitúciou centrálnych kationov v polyédroch jednotlivých vrstiev. Tieto anorganické kationy (napr. Na^+ , Ca^{2+}) môžu byť nahradené organickými molekulami/kationmi, ktoré sú často prítomné v pôde alebo odpadovej vode (napr. pesticídy, liečivá, kationy ťažkých kovov ap.) a zadržiavať ich vo svojej štruktúre pomocou tzv. výmennej reakcie kationov (Obr. 1).

VÝMENNÁ REAKCIA KATIÓNOV



OBRÁZOK 1

Schematické znázornenie štruktúry Na-montmorillonitu (T-O-T typ štruktúry) a vzniku organoílu výmenou anorganického kationu za organický.

Napučiavacia schopnosť ílov sa využíva aj pri príprave organoílov so špecifickými vlastnosťami, kedy môže byť malý organický kation nahradený väčšími organickými kationmi. Preto je veľmi dôležité študovať aj stabilitu týchto hybridných materiálov. Výskum a vývoj nových hybridných materiálov (organoílov) konvenčným spôsobom je často veľmi zdĺhavý proces, ktorý je navyše často aj finančne náročný. Nový materiál je nutné najskôr syntetizovať (drahé chemikálie, niekedy aj zdraviu vysoko škodlivé a vyžadujúce špeciálne zaobchádzanie) a následne otestovať jeho požadované fyzikálnochemické vlastnosti rôznymi experimentálnymi technikami (cena meracieho času, dostupnosť meraní, atď.). Napriek precíznej



Ing. Eva Scholtzová, CSc. pôsobí ako vedecká výskumníčka na Oddelení teoretickej chémie v Ústave anorganickej chémie v SAV.

syntéze a dôslednom testovaní novopripravený materiál nemusí spĺňať naše požiadavky vzhľadom k predom definovaným vlastnostiam. Veľké množstvo materiálu, energie a financií pomáhajú ušetriť práve metódy teoretickej chémie a využitie HPC.

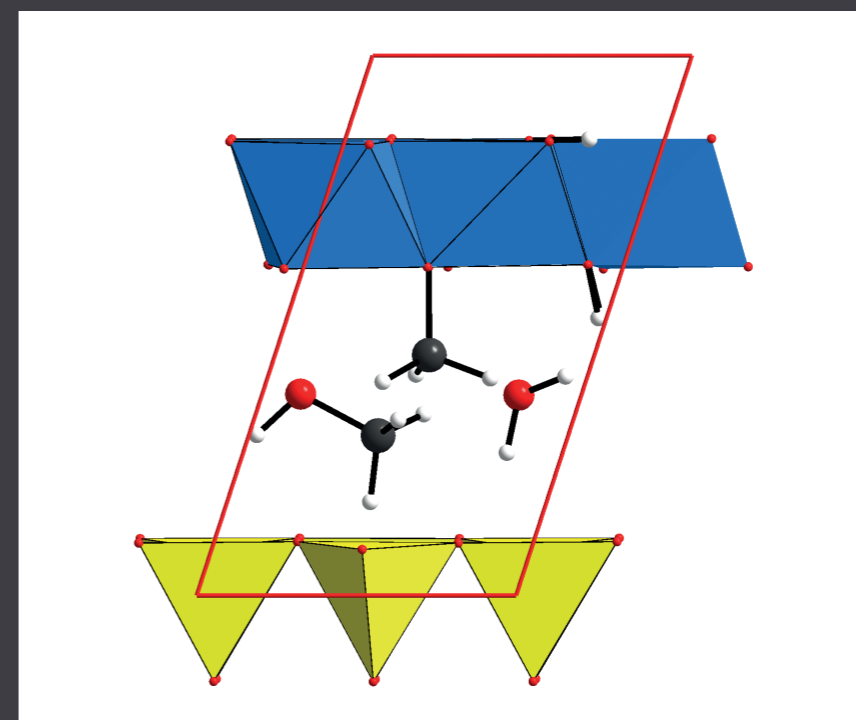
Vďaka enormnému rozvoju HPC a vývoju nových teoretických metód, ktorých využitie je dnes už bežnou praxou, je možné navrhovať čoraz sofistikovanejšie a realistickejšie modely tuhej fázy a teda aj hybridných materiálov. Použitím modelov o stovkách, niekedy i tisíckach atómov je možné nasimulovať štruktúru nového materiálu a skúmať jeho fyzikálnochemické vlastnosti. Množstvo experimentov sa tak vo významnej miere môže redukovať a efektívnejšie navrhovať, čím sa dá dospieť k získaniu materiálu s cieľovými vlastnosťami v oveľa kratšom čase.

Napríklad je veľmi dôležité vedieť ako prebieha interkalácia ílových minerálov pri príprave organoílov. Modely počítané kvantovochemickými metódami, napr. na báze *ab initio* DFT (Density Func-

tional Theory) dávajú efektívnu odpoveď na otázky ohľadom spôsobu viazania organických látok v medzivrstvách ílových minerálov, stability organoílov, ich mechanických a v neposlednom rade i spektrálnych vlastností. Namerané infračervené, Ramanove, ako aj UV/VIS spektrá bývajú pre tieto látky pomerne zložitá a identifikácia jednotlivých pásov značne obtiažna, ak nie nemožná (napr. v dôsledku prekryvu pásov). Tu pomôžu štruktúrne modely a výpočty. Detailná analýza vypočítaných vibračných módov jednotlivých funkčných skupín dokáže detailne popísať nielen jednotlivé pásy v spektre, ale aj objasniť veľmi jemné efekty, napr. červený/modrý posun CH vibračných pásov v infračervených spektrách. Výpočtové modely však musia byť dostatočne veľké, aby mohli byť sledované požadované vlastnosti, či javy. S veľkosťou modelu narastá aj výpočtová náročnosť a nutnosť použitia HPC. Jediné paralelným počítaním je možné dopracovať sa v reálnom čase k rozumným výsledkom na týchto modeloch (bežne cca 500 atómov).

Z dôvodu spomínaného efektívneho využitia výpočtových metód sa venujem aplikáciám výpočtových metód na štruktúru ílových minerálov ako aj hybridných materiálov na ich báze. Využitím paralelného počítania na Aurelovi bolo možné napr. popísať mechanické vlastnosti graftovaného kaolinitu metoxy skupinou, na základe ktorých sa zistilo, že je to perspektívny materiál pre prípravu polymérnych nanokompozitov. Prítomná metoxy- skupina v štruktúre kaolinitu zlepšuje exfoliačné vlastnosti kaolinitových vrstiev a tak sa tento organoíl (metoxy-kaolinit, Obr. 2a) lepšie rozptýli v polymérnej matici ako samotný nemoďifikovaný kaolinit. Takisto pomocou analýzy vypočítaných vibračných módov a porovnaním s experimentálne nameranými spektrami bolo možné zistiť, že bol nasyntetizovaný hybridný materiál, kde v medzivrstvách kaolinitu bola prítomná nielen graftovaná metoxy skupina, ale aj interkalovaný metanol a voda (Obr. 2b), zrejme z prebytku metanolu pri syntéze organoílu a voda je v ílových mineráloch bežne prítomná. Výpočty ukázali, že ich prítomnosť v medzivrstvách dokonca vylepšila exfoliačné vlastnosti graftovaného kaolinitu (cca + 15%).

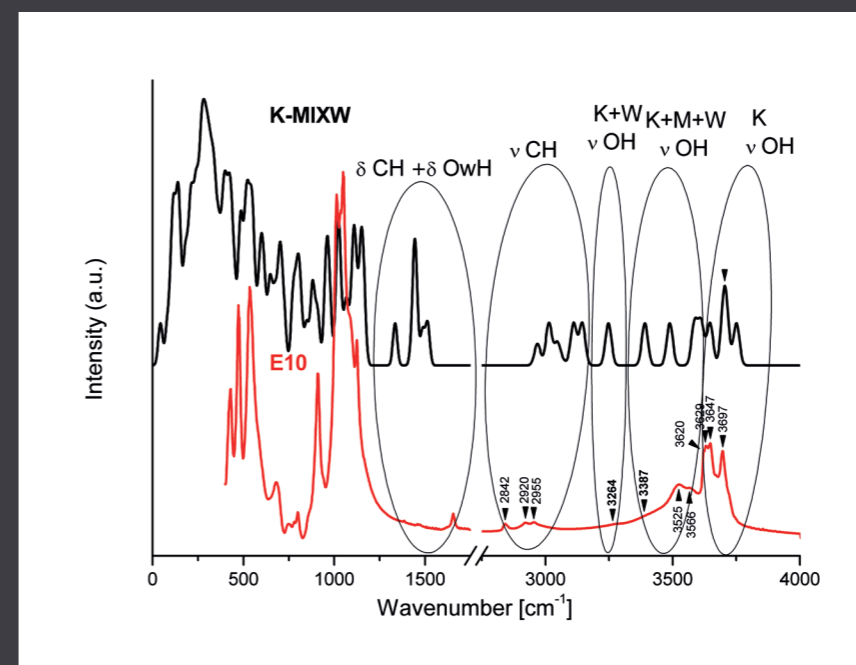
Využitím HPC sa tak dospelo k zaujímavým výsledkom, ktoré pomohli lepšie charakterizovať pripravený materiál a poukázať na jeho vhodné vlastnosti pri príprave nových polymérnych nanokompozitov.



OBRÁZOK 2A

Model štruktúry graftovaného kaolinitu metoxy skupinou s interkalovanou molekulou metanolu a vody v medzivrstvách (K-MIXW).

Modrá – oktaédrická sieť,
žltá – tetraédrická sieť,
červená – kyslík,
čierna – uhlík,
biela – vodík,
pohľad v osi a.



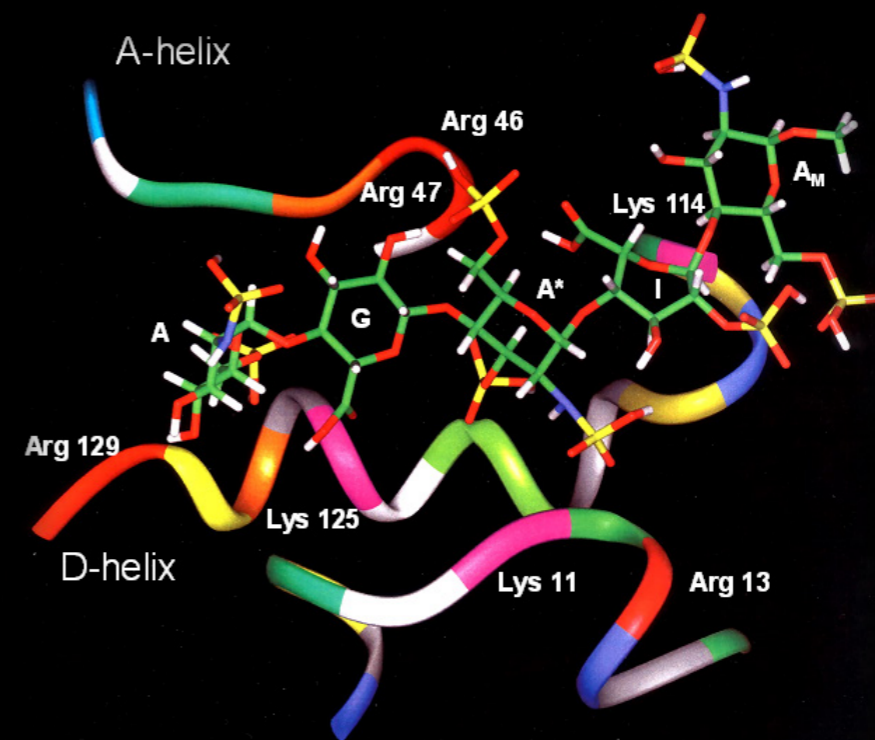
OBRÁZOK 2B

Vypočítané (čierna – K-MIXW) a experimentálne namerané FTIR spektrum (červená – vzorka E10) graftovaného kaolinitu metoxy skupinou. Legenda: K-MIXW – graftovaný kaolinit metoxy skupinou s metanolom a vodou v medzivrstvách, K – kaolinit, M – metanol, W – voda, OH – hydroxy skupina, CH – CH₃ skupina, ν – valenčná a δ – deformačná vibrácia.

Eva Scholtzová ďakuje za finančnú podporu Vedeckej grantovej agentúry VEGA (2/0021/19) a Agentúre na podporu výskumu a vývoja (APVV-18-0075).

Trojrozmerná štruktúra sacharidov a ich medzimolekulových komplexov s proteínmi

MILOŠ HRICOVÍNI



OBRÁZOK 1

Štruktúra komplexu metyl glykozidu heparín-pentasacharidu s proteínom antitrombínom III.

Ing. Miloš Hricovíni, PhD. pôsobí na Chemickom ústave SAV ako vedúci Oddelenia štruktúry a funkcie sacharidov.

Sacharidy a ich konjugáty patria k základným molekulám, ktoré sa nachádzajú v živých systémoch. Medzi najznámejšie patria sacharóza (zložená z dvoch monosacharidov - glukózy a fruktózy) a celulóza (lineárny polysacharid zložený z glukózy). Napriek tomu, že oba tieto sacharidy sú aj technologicky významnými zlúčeninami, záujem chemikov sa v súčasnosti sústreďuje najmä na deriváty s biologickými vlastnosťami, ktoré majú potenciálne využitie medicínskej chémie.

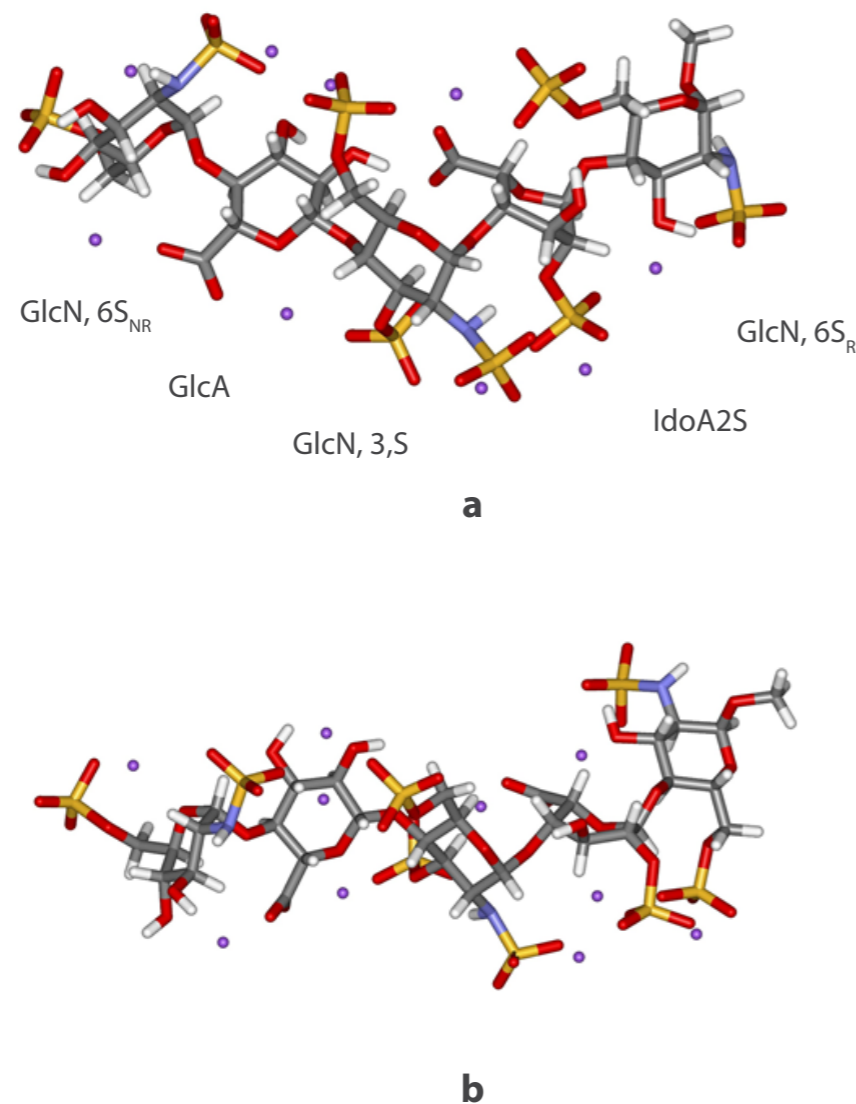
Význam sacharidov spočíva v ich rozmanitých biologických vlastnostiach – okrem toho, že sú známe ako zdroj energie, zohrávajú dôležitú úlohu aj pri rôznych biochemických dejoch v živých organizmoch. Významnú úlohu hrajú pri rôznych metabolických procesoch, napr. pri raste a diferenciacii buniek, angiogenéze, zrážaní krvi, zápalových procesoch atď. Rôznorodosť funkcií sacharidov je spôsobená predovšetkým ich štruktúrnou rozmanitosťou. Môžu sa vyskytovať vo forme relatívne malých molekúl (mono- a disacharidy) až po polyméry s lineárnymi alebo rozvetvenými štruktúrami, ktoré tvoria konjugáty s inými biomolekulami (napr. proteínmi, lipidmi).

Pre pochopenie funkcií sacharidov, ich derivátov alebo konjugovaných biomolekúl (glykokonjugátov) je nevyhnutná znalosť ich štruktúry, dynamických vlastností v roztoku a tvorba medzimolekulových komplexov. Okrem experimentálnych techník (v súčasnosti najmä NMR spektroskopia) je počítačová chémia neoddeliteľnou súčasťou analýzy biomolekúl. Medzi najviac študované deriváty sacharidov patria glykózaminoglykány, napr. heparín, chondroitín sulfát a kyselina hyaluronová. Antikoagulačné vlastnosti polysacharidu heparínu boli objavené približne pred sto rokmi a dlhodobo sa využívajú v medicínskej praxi (od konca 30-tych rokov minulého storočia). Analýza štruktúry heparínu trvala pomerne dlhú dobu, pričom mechanizmus jeho účinku bol odhalený až nedávno. Heparín je heterogénnym lineárnym polymérom, ktorý pozostáva z glukozamínových jednotiek (GlcN) a urónových kyselín (kyseliny idurónovej – IdoA resp. glukurónovej – GlcA), pričom väčšina sacharidových jednotiek obsahuje sulfátovú skupinu naviazanú v rôznych polohách. Molekula heparínu sa špecificky viaže na proteín antitrombín III, v dôsledku čoho sa následne spúšťa kaskáda procesov, ktoré majú za následok zmenu krvnej zrážanlivosti. Pre správny popis mechanizmu

tejto medzimolekulovej interakcie bolo nutné zistiť väzbové miesto heparínu (t. j. ktorá časť polysacharidu sa viaže na antitrombín) ako aj štruktúru väzbového miesta na proteíne. Zistilo sa, že približne každá tretia molekula heparínu obsahuje špecifickú sekvenciu piatich rôzne substituovaných pyranózových jednotiek – tri GlcN (2 x di- a 1 x trisubstituovaný), jednu IdoA (monosulfátovanú) a jednu GlcA (nesulfátovanú) (Obr. 2). Uvedený pentasacharid sa viaže na väzbové miesto v antitrombíne III (Obr. 1). Na základe NMR experimentov a následnej teoretickej interpretácie bolo možné dokázať,

OBRÁZOK 2

Štruktúra molekuly heparín-pentasacharidu (metyl glykozidu) získaná optimalizáciou geometrie použitím DFT metódy. Sekvencia piatich sacharidových jednotiek predstavuje väzbové miesto polysacharidu heparínu pri interakcii s proteínom antitrombínom III. V hornej časti obrázka (a) môžeme vidieť štruktúru, v ktorej je IdoA jednotka v 1C_4 forme, dolná časť obrázka (b) znázorňuje 2S_0 formu. Body fialovej farby v okolí molekuly predstavujú ióny sodíka.



že v roztoku dochádza k vzájomnej interakcii jednotlivých sulfátových skupín na pyranózových kruhoch s aminokyselinami vo väzbovom mieste – Arg129, Lys125, Lys11, Lys114, Arg13, Arg46 a Arg47. Napr. 6-SO₃⁻ skupina v GlcN6S jednotke interaguje s dvomi NH₂ skupinami v Arg129 a v Lys125, ďalšie interakcie sú medzi Lys125 a karboxylovou skupinou v GlcA, N-SO₃⁻ skupinou a Arg13 a Lys114. Všetky spomenuté aminokyseliny interagujú so záporne nabitými skupinami v heparíne, okrem 2-SO₃⁻ skupiny v IdoA. Funkcia tejto sulfónovej skupiny sa pri interakcii s proteínom prejavuje nepriamo – zmenou trojrozmernej štruktúry. Na základe DFT výpočtov uskutočnených na HTC bolo možné zistiť, že dochádza k posunu konformačnej rovnováhy IdoA jednotky vplyvom 2-SO₃⁻ skupiny (vzhľadom k nesubstituovanej forme) z 1C_4 formy (Obr. 2a) na 2S_0 formu (Obr. 2b) vo vodnom roztoku (v pomere približne 15 : 85). Pri

tvorbe komplexu s proteínom sa 2S_0 forma stabilizuje, t. j. vo väzbovom mieste je prítomná len 2S_0 forma. Prítomnosť 2-SO₃⁻ skupiny v IdoA jednotke vplyva na priestorové usporiadanie susednej redukujúcej GlcN jednotky, čo má za následok vznik trojrozmernej štruktúry ligandu (pentasacharidu), ktorý umožňuje interakciu jej N-sulfónovej skupiny s Arg46, Arg47 a Lys114 v proteín-pentasacharidovom komplexe. Ak IdoA jednotka nie je substituovaná, konformácia v roztoku je výrazne posunutá na stranu 1C_4 formy a energia potrebná na vytvorenie proteín-sacharidového komplexu je väčšia, čo spôsobuje zníženie aktivity pentasacharidu (približne o dva rády).

Uvedená interakcia medzi pentasacharidom a antitrombínom, ako aj ďalšie interakcie medzi oligosacharidmi heparínového typu (tetrasacharidy, hexasacharidy a ich interakcie s rastovými faktormi – proteínmi, ktoré sú dôležité pri medzibunkovej komunikácii), patria medzi veľmi špecifické deje, ktoré sú dôležitou súčasťou metabolických procesov v ľudskom organizme. Podrobná analýza trojrozmernej štruktúry sacharidov, proteínov a ich medzimolekulových komplexov pomocou teoretických metód prispieva k pochopeniu rôznych dôležitých biochemických procesov, ktoré sa odohrávajú v živých organizmoch a sú nevyhnutné pre ich existenciu.

Podrobná analýza trojrozmernej štruktúry sacharidov, proteínov a ich medzimolekulových komplexov pomocou teoretických metód prispieva k pochopeniu rôznych dôležitých biochemických procesov.





VYSOKOVÝKONNÉ
POČÍTANIE
A PREDPOVEĎ
POČASIA NA SHMÚ

JOZEF VIVODA
MARTIN BELLUŠ
MÁRIA DERKOVÁ



Mgr. Jozef Vivoda
v súčasnosti
pracuje v oblasti
numerickej
predpovede
počasí v SHMÚ.
Venuje sa
výskumu
dynamiky
atmosférických
modelov.
Najnovšia
publikácia:
„Konečné prvky
používané pri
vertikálnej
diskretizácii plne
stlačiteľného jadra
systému ALADIN“.

Predpovedou počasia pomocou numerických matematických metód riešenia fyzikálnych rovníc popisujúcich atmosférické procesy na výkonných výpočtových systémoch sa zaoberá časť meteorológie označovaná ako numerická predpoveď počasia. Ide o aplikovaný vedecký odbor, ktorý vznikol spoločne s prvým počítačom ENIAC v USA. V roku 1950 na ňom J. Charney na podnet J. von Neumanna spočítal prvú úspešnú predpoveď počasia na základe rovnice barotropickej vorticity. Prvé operatívne nasadenie numerickej predpovede počasia sa uskutočnilo v roku 1954 vo Švédsku a následne o niekoľko mesiacov neskôr v USA. Slovensko si muselo na prvú operatívnu numerickú predpoveď počasia počkať do 1. júla 2004. Vtedy bola spustená automatická prevádzka numerického predpovedného modelu ALADIN na vysokovýkonnom systéme na **Slovenskom hydrometeorologickom ústave (SHMÚ)**, ktorý bol dodaný v januári toho istého roku. Išlo o systém IBM Regata p690 s 32 CPU POWER4 s 32 GB operačnej pamäte. Tento nám umožnil začať operatívne počítať predpoveď počasia na horizontálnej mriežke 9 km × 9 km s 37 vertikálnymi hladinami.

Dodaniu technológie IBM v roku 2004 predchádzalo strategické rozhodnutie SHMÚ pripojiť sa ku konzorciu ALADIN (www.cnrm.meteo.fr/aladin/). Podpísaním memoranda o porozumení v roku 1992 sa odborníci zo SHMÚ a z akademického sektora stali súčasťou medzinárodného tímu, ktorý vyvíjal model ALADIN. Tento bol koncipovaný ako verzia globálneho modelu ARPEGE na ohraničenej oblasti. Vývoj sa uskutočňoval pod vedením francúzskej meteorologickej služby Météo-France, ktorá až do dnešných dní poskytuje partnerom konzorcia výstupy globálneho modelu ARPEGE. Tieto sa používajú ako počiatočné a okrajové podmienky pri operatívnej prevádzke modelu ALADIN v jednotlivých meteorologických službách Európy a niekoľkých krajinách severnej Afriky.

Zdrojový kód modelu ALADIN bol vždy koncipovaný tak, aby ho bolo možné efektívne spustiť na rôznych počítačových platformách. Model využíva hybridnú paralelizáciu (kombinácia MPI a OpenMP) a zároveň obsahuje vnútorný parameter na kontrolu dĺžky blokov, s ktorými sa realizuje hlavná výpočtová slučka. Toto umožňuje efektívne spustenie modelu na vysokovýkonných systémoch s rôznou topológiou, so skalárnymi, ale aj vektorovými výpočtovými jadrami. Portabilita ALADIN systému na rôzne výpočtové platformy je zaručená tým, že potrebné úpravy zdrojového kódu pre rôzne platformy, ako aj jeho optimalizácia napr. kvôli lepšej skalabilite či vektorizácii, je realizovaná formou direktív pre kompiláto-

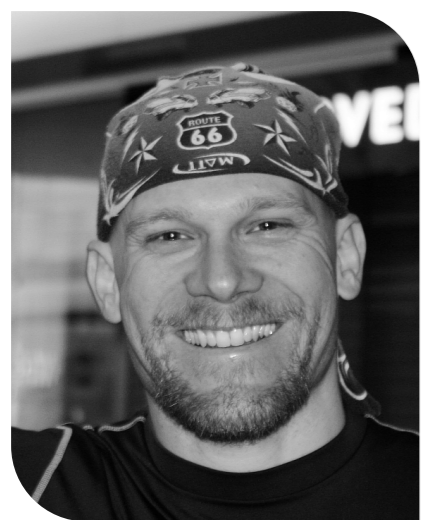
ry. Momentálne je pripravovaná tzv. single precision verzia zdrojového kódu, ktorá je asi o 40% rýchlejšia ako pôvodná double precision verzia. Úprava zdrojového kódu pre GPU sa plánuje v najbližších rokoch. Dôraz je kladený na nahradenie klasických fortránovských konštrukcií objektovo orientovaným modelom, ktorý by mal v budúcnosti zjednodušiť využitie modelu s komplexnými algoritmami optimálneho odhadu.

Prevádzka modelu ALADIN je podmienená povinnosťou SHMÚ sa aktívne spolupodieľať na výskume a vývoji modelu a na údržbe jeho zdrojového kódu v rozsahu 2 FTE. V strednej Európe sa členské štáty ACCORD konzorcia rozhodli svoju spoluprácu posilniť nad rámec existujúceho memoranda a tak v roku 1994 vzniklo združenie RC LACE (Regional Cooperation for Limited Area modeling in Central Europe, www.rclace.eu) s vlastným rozpočtom, manažmentom a podporou mobility medzi členmi združenia. Ide o unikátny príklad spolupráce v strednej Európe v oblasti prírodných vied s priamou aplikáciou výsledkov do praxe. Podrobnejšie informácie o ACCORD konzorciu sa dočítate v dole uvedenom oranžovom rámečku.

Moderná predpoveď počasia rieši dve základné úlohy. Prvou úlohou je príprava počiatočných podmienok z meraní nerovnomerne rozložených v priestore a v čase optimálnou metódou, a druhou úlohou je výpočet predpovede počasia na základe známych počiatočných podmienok. Takto formulovaný problém vedie k deterministickej predpovedi. Tento typ predpovede v súčasnosti SHMÚ produkuje 4-krát denne a dáva k dispozícii širokej verejnosti produkty až na 3 dni vopred s 1 hodinovým krokom. Verejnosti najznámejšie je zobrazenie týchto produktov formou meteogramov.

SHMÚ je členom ACCORD, najväčšieho výskumného konzorcia na svete zameraného na výskum a vývoj predpovedí počasia na regionálnych škálach. ACCORD (<http://www.umr-cnrm.fr/accord/>) je partnerstvo národných meteorologických služieb z 26 európskych krajín vrátane Slovenska. Kľúčovým cieľom ACCORD je posilniť a najmä zdieľať výskum a vývoj spoločného kódu modelu numerickej predpovede počasia a poskytnúť tak každému členovi konzorcia predpovedný model na úrovni dnešného poznania, ktorý môže používať na operatívnu predpoveď počasia vo vysokom rozlíšení.

Slovensko si muselo na prvú operatívnu numerickú predpoveď počasia počkať do 1. júla 2004. Spustená bola na vysokovýkonnom systéme na SHMÚ.

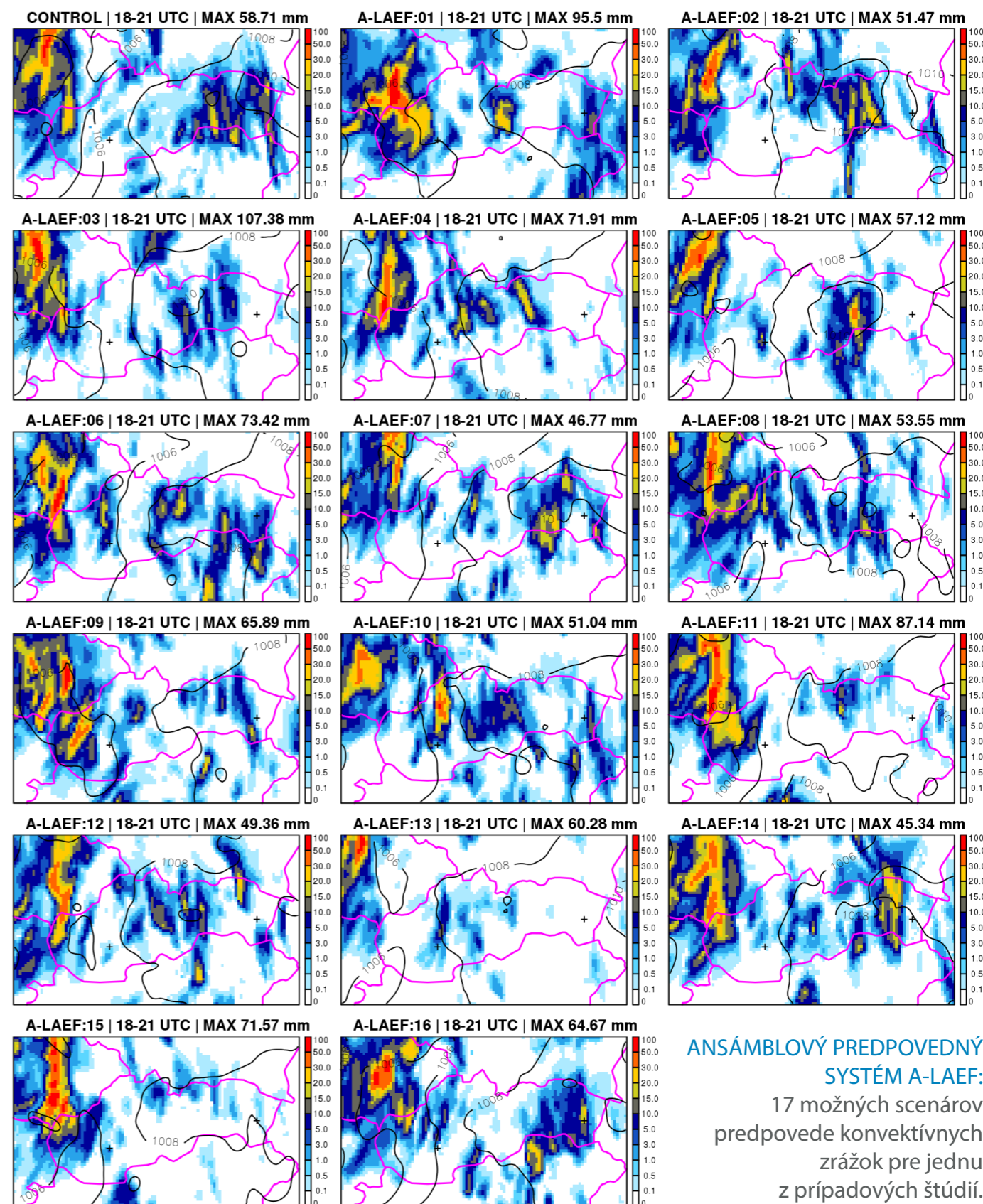


Mgr. Martin Belluš pracuje na oddelení Numerickej predpovede počasia v SHMÚ a venuje sa výskumu prediktability atmosféry. Vyvinul a do prevádzky uviedol ansámblový predpovedný systém A-LAEF, ktorý lepšie zachytáva extrémne prejavy počasia na najbližšie 3 dni.

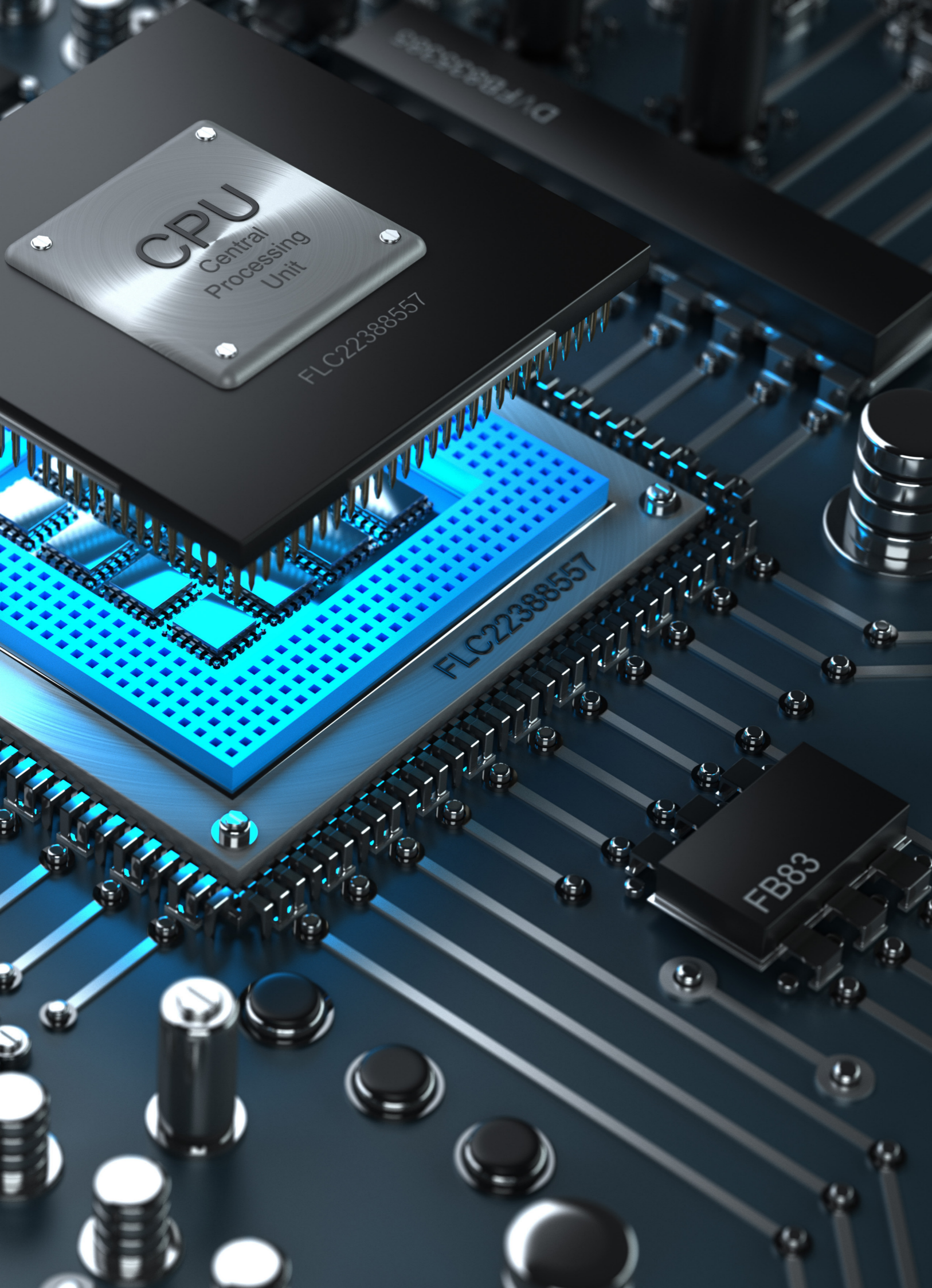
V druhej polovici 20. storočia objavil Edward Lorenz chaotickú podstatu správania sa dynamických systémov. Problém predpovede počasia je typický prototyp chaotického systému, kde predpoveď (v zmysle časového vývoja atmosférického stavu) vypočítaná z veľmi podobných rovnako pravdepodobných počiatočných podmienok môže viesť k odlišným predpovediam. Táto odlišnosť sa prejaví na časovej škále niekoľkých dní, ak ide o predpoveď veľkopriestorových javov ako sú polohy atmosférických frontov, a niekoľko hodín, ak ide o predpoveď organizovanej konvekcie, prípadne niekoľko desiatok minút ak ide o predpoveď javov ako lokálne letné búrky.

Metódy numerickej predpovede počasia preto prechádzajú od deterministickej predpovede k pravdepodobnostnej, ktorá sa realizuje tzv. ansámblom predpovedí. Princípom ansámblového prístupu je spočítať sadu predpovedí vychádzajúcich z rovnako pravdepodobných, ale málo odlišných počiatočných podmienok. Odlišnosť jednotlivých stavov atmosféry by pritom mala korešpondovať s presnosťou, resp. chybami merania jednotlivých meteorologických prvkov, ako sú napríklad teplota a vlhkosť. Okrem neurčitosti počiatočného stavu atmosféry sa simuluje aj neurči-

tosť samotného numerického modelu, keďže žiadny model nepopisuje realitu dokonale. Toto robíme s využitím rôznych fyzikálnych schém pre jednotlivé členy ansámbľa, ale aj pomocou stochastických perturbácií príspevkov z fyzikálnych procesov. Ďalšou používanou metódou je perturbovanie samotných parametrov v rôznych fyzikálnych schémach, napríklad pre turbulenciu. Výstupom týchto systémov potom nebývajú iba konkrétne očakávané hodnoty predpovedaných prvkov, ale aj pravdepodobnosť výskytu rozsahu týchto hodnôt. Obrovskou výhodou ansámblov oproti deterministickej predpovedi je, že má potenciál zachytiť aj menej pravdepodobné scenáre s extrémnym vývojom počasia. Experti SHMÚ zohrali kľúčovú úlohu pri vývoji systému ansámblových predpovedí A-LAEF (ALARO - Limited Area Ensemble Forecasting), ktorý prevádzkuje združenie RC LACE na superpočítači v ECMWF (European Centre for Medium-range Weather Forecasts). Ansámblový predpovedný systém A-LAEF pozostáva zo 16 perturbovaných predpovedí a 1 kontrolného behu, všetky s horizontálnym rozlíšením 4.8 km a 60 vertikálnymi hladinami. Výpočet celého ansámbľa prebieha 2-krát denne na najbližšie 3 dni dopredu na systéme CRAY XC30 zloženom z viac ako 3500 nódov



ANSÁMBLOVÝ PREDPOVEDNÝ SYSTÉM A-LAEF:
17 možných scenárov predpovede konvektívnych zrážok pre jednu z prípadových štúdií.



s 36 výpočtovými jadrami na technológii CPU Intel Broadwell. Žiadny súčasný člen RC LACE nemá lokálne k dispozícii porovnateľný výpočtový výkon na prevádzku podobného ansámblového systému na takej veľkej výpočtovej oblasti.

Na SHMÚ je v súčasnosti po dvoch upgradoch výpočtového výkonu v roku 2010 a v roku 2014 k dispozícii 22 nódov. Z nich 10 je typu IBM p755 s 32 jadrami typu POWER7 a 256 GB pamäte na nód a 12 je novšieho typu IBM Flex p460 s jadrami typu POWER7+. Dostupný výkon na SHMÚ za obdobie od roku 2004 vzrástol približne 20-násobne. Toto nám umožnilo implementovať na SHMÚ systém asimilácie prízemných pozorovaní a metódu blendingu, ktorý umožňuje vylepšiť počítačový stav modelu ALADIN kombináciou predpovede lokálneho modelu s počítačovými podmienkami z globálneho modelu ARPEGE. Začiatkom roku 2017 sme implementovali verziu modelu ALADIN s rozlíšením 4.5 km x 4.5 km a 63 vertikálnymi hladinami. Do 10 rokov túto oblasť rozlíšenia postupne dosiahnu globálne atmosférické modely a príslušné ansámblové systémy na nich založené. V blízkej budúcnosti sa preto musí numerická predpoveď počasia na SHMÚ rozvíjať dvoma potenciálnymi smermi podľa dostupného výpočtového výkonu. Bude sa zvyšovať rozlíšenie deterministického modelu na 1 km, so 100 a viac hladinami. Ak to výpočtový výkon dostupný na SHMÚ umožní, tak začneme implementovať systém pravdepodobnostnej predpovede na týchto rozlíšeniach, ale zrejme na menšom území. Predpovede budú obnovované aspoň každé 3 hodiny. V týchto priestorových škálach sa odohrávajú konvektívne procesy, tvoria sa zimné inverzie v údoliach a ranné radiačné hmly, prebieha stekanie studeného vzduchu po povrchu do údolí po tom, ako sa radiačne vychladí nad snehovou pokrývkou a podobne. Na modelovanie týchto javov nestačí iba zvýšiť rozlíšenie, ale je potrebné vyvinúť nové prístupy k výpočtu radiacie a jej interakcie s oblačnosťou, nové prístupy výpočtu turbulencie a zdokonalenie algoritmov, ktoré popisujú v modeli tvorbu oblačnosti a zrážok. Okrem toho bude potrebné zvýšiť stabilitu použitých numerických schém, či využiť nové typy meraní atmosférických parametrov s vysokým priestorovým a časovým rozlíšením na získanie realistického popisu aktuálneho stavu. Je potrebné upresniť údaje – fyziografické databázy, ktoré popisujú vlastnosti zemského povrchu a jeho interakciu s atmosférou. Nové verzie modelu ALADIN, na ktorých konzorcium a RC LACE pracuje, prinesú v blízkej budúcnosti zlepšenie kvality predpovedí najmä z hľadiska vyššie popísaných javov.



Mgr. Mária Derková, PhD.
pracuje
na oddelení
Numerickej
predpovede
počasia v SHMÚ.
Venuje sa
problematike
asimilácie dát,
v tejto oblasti
vedie aj bakalárske
a diplomové práce
študentov FMFI UK.



Numerická predpoveď počasia a vysokovýkonné počítanie sú prepojené nádoby, ktoré sa navzájom ovplyvňujú.

Najväčším problémom strategického plánovania v oblasti numerickej predpovede počasia na Slovensku je absencia garancií pri pravidelnej obnove výpočtového výkonu na SHMÚ.

V súčasnosti sa ukončuje implementácia nového výkonného výpočtového systému na SHMÚ. Ide o 240 nódov, kde každý nód bude osadený 2 procesormi Intel Xeon Gold 6230 s 20 jadrami. Nódy budú prepojené technológiou OmniPath. Podľa požadovaných výkonnostných testov, ktoré mali dodávateľia splniť, očakávame nárast výkonu asi 30- až 40-násobne voči existujúcemu stavu. Tento systém bude k dispozícii expertom zo SHMÚ v priebehu tretieho kvartálu 2021.

Na novom systéme sa okrem atmosférického predpovedného modelu ALADIN budú operatívne prevádzkovať okolo roku 2022 aj modely kvality ovzdušia. Momentálne sme začali vývoj interfacie medzi modelom ALADIN a týmito modelmi znečistenia atmosféry, od ktorých očakávame spresnenie výstrah na výskyt koncentrácií nebezpečných látok aj v lo-

kalitách, kde SHMÚ z finančných dôvodov nerealizuje monitoring v reálnom čase.

Všeobecne platí, že čím je vyššie rozlíšenie predpovedného modelu, tým väčšie sú požiadavky na presnosť počiatkových podmienok. Naša hlavná pozornosť sa preto dnes sústreďuje na implementáciu metód, ktoré nám umožnia upresňovať počiatkové podmienky pomocou dát, ktoré v sebe obsahujú meteorologický signál s vysokým priestorovým rozlíšením, a to najmä radarov a satelitov. V súčasnosti sme aktívne zapojení do vývoja kontroly kvality radarových údajov a do ich preprocesingu za účelom následného použitia v procese prípravy počiatkových podmienok. Testujeme použitie nových zdrojov údajov, pozorovania z lietadiel, použitie ZTD (Zenith Total Delay) a STD (Slant Total Delay) z navigačných satelitných systémov.

Najväčším problémom strategického plánovania v oblasti numerickej predpovede počasia na Slovensku je absencia garancií pri pravidelnej obnove výpočtového výkonu na SHMÚ. Sme presvedčení, že táto situácia vychádza z nepochopenia nepriamej ekonomickej hodnoty, ktorú kvalitná predpoveď počasia prináša. Zvykli sme si na to, že výstrahy a predpovede sú k dispozícii zadarmo a ich kvalita sa postupne zvyšuje. **Podvedome riadime naše správanie podľa týchto informácií a ani si neuvedomujeme, aký veľký dopad tieto informácie majú nielen na každodenný život, ale aj na turizmus, logistiku, leteckú dopravu, ochranu pred radiačným nebezpečenstvom a všeobecne na naše aktivity.** Predpovedný model ALADIN a jeho produkty majú prierezový charakter v hospodárstve SR a ovplyvňujú nepriamo každú oblasť našej ekonomiky. In-

fraštruktúra SHMÚ, na ktorej sa výpočet numerickej predpovede počasia realizuje, patrí do kritickej infraštruktúry SR. Neexistuje však stratégia obnovy výpočtovej techniky priamo zo štátneho rozpočtu. Pritom ekonomické štúdie nepriameho ekonomického dopadu existujúce v iných krajinách (USA, EU) ukazujú, že každé Euro investované do oblasti numerickej predpovede počasia sa vráti niekoľko desaťnásobne ešte v tom istom roku, kým napríklad návratnosť investícií do diaľnic je na ročnej škále iba dvojnásobná.

Numerická predpoveď počasia a vysokovýkonné počítanie sú prepojené nádoby, ktoré sa navzájom ovplyvňujú. Komplexnosť numerickej predpovednej modelov bola vždy limitovaná dostupným výpočtovým výkonom tak, aby doba výpočtu jednodňovej predpovede nepresiahla dobu niekoľkých minút. Toto pravidlo platí aj dnes, a aby sme ho boli schopní dodržať pri zachovaní kvality produktov na hranici dnešného poznania, potrebujeme vysokovýkonné technológie s výkonom stoviek Tflops.

Budúcnosť numerickej predpovede počasia na Slovensku závisí nielen od SHMÚ, ale najmä od dostatočného počtu dobre pripravených absolventov vysokých škôl, ktorí budú rozumieť fyzike atmosféry, numerickej matematickej metód a zároveň budú vzdelaní aj v oblasti programovacích metód na superpočítačoch. Takáto aktivita presahuje rámec činnosti SHMÚ a veľmi dobre si preto uvedomujeme, že Slovensko potrebuje posilňovať centrá vysokovýkonného počítania, ktoré budú schopné poskytovať priestor na vzdelávanie v oblastiach potrebných pre numerickej predpovede počasia. Táto synergie na Slovensku vzniká a veríme, že bude úspešná.



Popularizácia HPC

1 Národné kompetenčné centrum pre HPC na najväčšej IT konferencii na Slovensku

V dňoch 7. – 9. decembra 2020 sa v Bratislave konal už 19. ročník najväčšej IT konferencie na Slovensku – ITAPA. Projekt EuroCC a Národné kompetenčné centrum pre vysokovýkonné výpočty na tomto medzinárodnom kongrese predstavil Lukáš Demovič, riaditeľ Centra spoločných činností Slovenskej akadémie vied (CSČ SAV) a predseda správnej rady Národného superpočítačového centra (NSCC).



Počas svojej prednášky L. Demovič priblížil účastníkom projekt EuroCC a jeho ciele a zdôraznil aj dôležitosť superpočítačov pre rozvoj inovácií na Slovensku a ich nevyhnutnosť pri digitalizácii a transformácii priemyslu. Práve prostredníctvom služieb, ktoré NCC pre HPC na Slovensku poskytuje, môžu podniky, ale aj subjekty z akademického prostredia a štátnej správy, začať využívať nástroje HPC, umelej inteligencie, HPDA a strojového učenia.

Centrum spoločných činností SAV je spolu s Ministerstvom investícií, regionálneho rozvoja a informatizácie SR (MIRRI SK) a konzorciom I4DI členom Národného superpočítačového cen-

tra. NSCC bude s Národným kompetenčným centrom pre HPC úzko spolupracovať na rozvoji HPC oblasti na Slovensku.

O význame základného a aplikovaného výskumu v rámci transformácie slovenského priemyslu debatoval L. Demovič v diskusnom paneli s ďalšími účastníkmi, vrátane podpredsedu vlády a ministra hospodárstva Slovenskej republiky, Richarda Sulíka.

2 Jarná škola PRACE



PRACE je výskumná infraštruktúra zameraná na vedecký výskum a vývoj s cieľom zvýšiť európsku konkurencieschopnosť, ktorá bola založená 23. apríla 2010 ako medzinárodná nezisková asociácia so sídlom v Bruseli. Súčasťou výskumnej infraštruktúry PRACE je 26 členských krajín, ktoré vytvárajú celoeurópsku superpočítačovú infraštruktúru. Slovensku republiku v projekte PRACE zastupuje Centrum spoločných činností SAV – Výpočtové stredisko. Partnerstvo pre vyspelú výpočtovú techniku v Európe pravidelne ponúka rôzne vzdelávacie kurzy a workshopy organizované jednotlivými členskými krajinami.



V júni tohto roka Centrum spoločných činností SAV organizovalo PRACE jarnú školu, tentokrát s témou Modelovania materiálov s použitím HPC a nástrojov umelej inteligencie a strojového učenia. Workshop sa konal v dňoch 15. – 18. júna 2021 ako online podujatie.

Sme veľmi radi, že naše pozvanie prijali členovia VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) tímu z University vo Viedni: prof. George Kresse, Dr. Martijn Marsman, Dr. Martin Schlipf, Dr. Ferenc Karsai a Dr. Marie – Therese Hübsch. Medzi lektormi bol aj Dr. Tomáš Bučko z Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave. Svoje skúsenosti s aplikáciou nástrojov strojového učenia na chemické problémy s nami zdieľala aj rečníčka z druhej najväčšej univerzity vo Fínsku - Prof. Milica Todorovic (University of Turku).

Účastníci získali nové poznatky o modelovaní materiálov od teoretických konceptov, implementácie paralelných algoritmov až po efektívne použitie aplikácií a programov v HPC prostredí. Workshop bol zameraný aj na využitie nástrojov a techník strojového učenia na riešenie chemických problémov a dizajn nových materiálov so špecifickými vlastnosťami.

3

Bezplatné vzdelávacie aktivity Národného kompetenčného centra pre HPC

Experti z Národného kompetenčného centra pre vysokovýkonné počítanie pravidelne organizujú bezplatné IT kurzy na rôzne zaujímavé témy, akými napríklad sú: paralelné programovanie, práca v HPC prostredí, neurónové siete, základy strojového učenia a práca s Big Data či programovanie a práca s grafickými akcelerátormi GPU/CUDA a OpenCL. Kurzy sú určené pre všetkých záujemcov z vedeckej komunity, ale aj širšej verejnosti.

Momentálne v Národnom kompetenčnom centre pre HPC pripravujeme sériu popularizačných a vzdelávacích prednášok o vysokovýkonnom počítaní. Prednášky začnú v septembri a priblížia vám použitie superpočítačov v rôznych vedných odboroch. Dozviete sa viac o architektúre a softvérovom vybavení superpočítačov, o paralelných výpočtoch a algoritmoch aj o vizualizácii vedeckých dát.

Na stránke [Národného kompetenčného centra pre HPC](#) nájdete veľa užitočných informácií, ako napríklad aktuálne novinky zo sveta HPC, otvorené či pripravované výzvy, informácie o kurzoch, hackathonch a podujatiach.

Odoberajte [newsletter NCC](#), ak nechcete nič zmeškať. Sledujte Národné kompetenčné centrum aj na [sociálnych sieťach!](#)



V Národnom kompetenčnom centre pre HPC pripravujeme sériu popularizačných a vzdelávacích prednášok o vysokovýkonnom počítaní.

PRACE

SEASONAL SCHOOL

ON BIOINFORMATICS

Jednou z aktivít VS SAV, v rámci projektu **PRACE**, je organizovanie workshop-ov v oblasti HPC, prostredníctvom tzv. "Seasonal Schools". Tie sa organizujú zvyčajne štyrikrát do roka v rôznych členských krajinách združenia PRACE. Hostiteľská organizácia si pritom zvolí tému a trvanie workshopu, ktoré zvykne byť v rozsahu 3 až 5 dní. Výpočtové stredisko SAV už v minulosti jedno takéto podujatie organizovalo a to v januári 2016 na tému HPC implementácií a aplikácií metód funkcionálu hustoty (DFT) v chémii a tuhej fáze.

Naším záujmom je rozširovanie spektra vedných oblastí využívajúcich naše HPC služby, a nakoľko popularita bioinformatiky a „strojového učenia“ (machine learning) neustále rastie, rozhodli sme sa tento rok zorganizovať „seasonal school“ zameranú práve na tieto oblasti. V priebehu niekoľkých mesiacov pred začiatkom samotného podujatia, sme sa stretávali s vedeckými skupinami na ústavoch SAV a univerzitách v snahe zistiť, ktorý aspekt alebo podoblasť tejto širokej vednej disciplíny, akou bioinformatika bezosporu je, je pre nich kľúčový. Plánovanie bolo o to zložitejšie, že prienik záujmu (a používaných softvérových prostriedkov) medzi vedeckými skupinami pôsobiacimi na Slovensku nie je veľký, a že väčšina skupín si doposiaľ vystačila s výpočtovým výkonom bežného desktopu alebo lokálne prevádzkovaného servera. Na základe týchto skutočností sme sa pri navrhovaní programu workshop-u rozhodli ísť cestou kompromisu a orientovať sa na najpopulárnejší bioinformatický programový balík BLAST (Basic Local Alignment Search Tool) a univerzálne nástroje na spracovanie (Apache Spark) a štatistickú analýzu (jazyk R) „veľkých dát“.



Workshop sa uskutočnil v dňoch 23. až 26. apríla 2018, v priestoroch Centra biológie rastlín a biodiverzity SAV. Zúčastnilo sa ho 34 vedcov zo Slovenska, Česka a Rakúska, celkovo z 13-tich rôznych inštitúcií. Prednášajúcimi boli prof. Erik Bongcam Rudloff (prednáška „Úvod do bioinformatiky“), profesor bioinformatiky na švédskej University of Agricultural Sciences, a trojica odborníkov z fínskeho CSC (Centre for Scientific Computing): Dr. Seija Sirkiä (prednáška a hands-on „Paralelné programovanie v jazyku R“), Dr. Kimmo Mattila (prednáška a hands-on „BLAST v HPC prostredí“) a Apurva Nandan (prednáška a hands-on „Analýza veľkých dát pomocou Apache Spark“). Počas workshop-u mali účastníci k dispozícii výpočtový klaster zaobstaraný z projektu SIVVP a nainštalovaný na Ústave Experimentálnej fyziky SAV v Košiciach, ktorý im (vdaka x86-64 architektúre) ponúkol možnosť otestovať si príslušné softvé-

rové prostriedky počas „hands-on“ blokov.

Účastníci, ktorí nemali doposiaľ skúsenosti s prácou v HPC prostredí, mali možnosť absolvovať jednodňových „rýchlokurz“ pre začiatím workshop-u pod vedením lektorov z VS SAV, ktorú sme prednášali aj formou telekonferencie. Zo spätnej väzby od účastníkov sme sa dozvedeli, že workshop do veľkej miery naplnil ich očakávanie. Naším cieľom bolo hlavne prilákať široké spektrum (súčasných aj budúcich) HPC používateľov, či už v bioinformatike pracujú, alebo s ňou iba začínajú, ale aj informovať ich o možnostiach, ktoré im VS SAV ponúka. Veríme, že túto ponuku využijú.

Na záver by sme chceli poďakovať Mgr. Lubošovi Klučárovi, PhD. z Ústavu molekulárnej biológie SAV, za početné konzultácie a pomoc, nie len pri výbere prednášajúcich.



Superhrdinovia VEDY



• Visegrad Fund

Vysokovýkonné výpočty a hlavne superpočítač sa stali nevyhnutnými pre rozvoj všetkých vedeckých oblastí a stávajú sa tretím pilierom vedy po teórii a experimente. Preto je nesmierne dôležitá popularizácia superpočítačov a ich využitie na zlepšenie každodenného života ľudí.

Cieľom projektu **Superhrdinovia vedy** bolo preto vysvetliť fundamentálnu úlohu, ktorú zohrávajú superpočítače v inováciách a vedeckých pokrokoch, výhody ich používania a zdôrazniť ich využitie v každodennom živote. Projekt vysvetľuje čo znamená HPC, ako funguje a ako sa používa v konkrétnych príkladoch zo skutočného života. Najnovšie pokroky výpočtových technológií a výskumu by mali inšpirovať cieľové publikum, alebo aspoň zvýšiť transparentnosť nasadenia HPC.

Každý partner projektu reprezentuje jeden zo štátov aliancie Vyšehradská štvorka. Sú nimi **Vládna agentúra pre informačno-technologický rozvoj (Maďarsko)**, **Výpočtové stredisko Centra spoločných činností Slovenskej akadémie vied (Slovensko)**, **Poznanské superpočítačové a sieťové centrum (Poľsko)** a **VŠB – Technická univerzita Ostrava/IT4Innovations (Česká republika)**. Každý z nich prevádzkuje národnú superpočítačovú infraštruktúru a investuje veľa námahy do popularizačných aktivít, aby vysvetlili čo je to superpočítanie, prečo je nevyhnutné, a prečo je oprávnenou investíciou. Ale pochopenie vedeckých tém a superpočítačov nie je pre neodborníkov jednoduché. Ak chceme, aby bola všetka komunikácia zrozumiteľná, prispôbili sme všetky materiály na šírenie informácií pre rôzne úrovne veku, vzdelávania a odborných znalostí. Cieľom projektu je nielen vzdelávať širokú verejnosť, ale aj inšpirovať mladšiu generáciu v krajinách V4, inšpirovať a motivovať ich a zapáliť v nich vášeň pre technické predmety – vedy, technológiu, inžinierstvo a matematiku. Práve absolventi týchto disciplín sú potrební nielen ako prevádzkovatelia HPC infraštruktúr, ale aj ako používatelia našich superhrdinov vedy – **superpočítačov**.



2021

RIADITEL CSČ SAV
Lukáš Demovič

ZODPOVEDNÝ REDAKTOR
Lucia Demovičová

GRAFIKA A DTP
Gabriela Obadalová

FOTOGRAFIE
Pavol Novák
Shutterstock

PERIODICITA
Raz ročne

VYDAVATEL
Centrum spoločných
činností SAV
Výpočtové stredisko
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

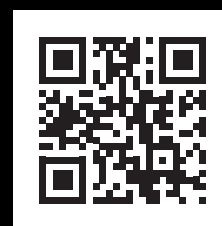
ISBN 978-80-89871-07-0
ISSN 2729-9090

Texty neprešli jazykovou korektúrou.

Centrum spoločných činností SAV
Výpočtové stredisko

Dúbravská cesta 9
845 35 Bratislava
Slovenská republika

www.vs.sav.sk



ISBN 978-80-89871-07-0
ISSN 2729-9090