Časopis Výpočtového strediska Slovenskej akadémie vied

2022

hpc focus

EURO
SLOVAKIA

ISBN 978-80-89871-13-1
ISSN 2729-9090

Úvodné slovo redakcie

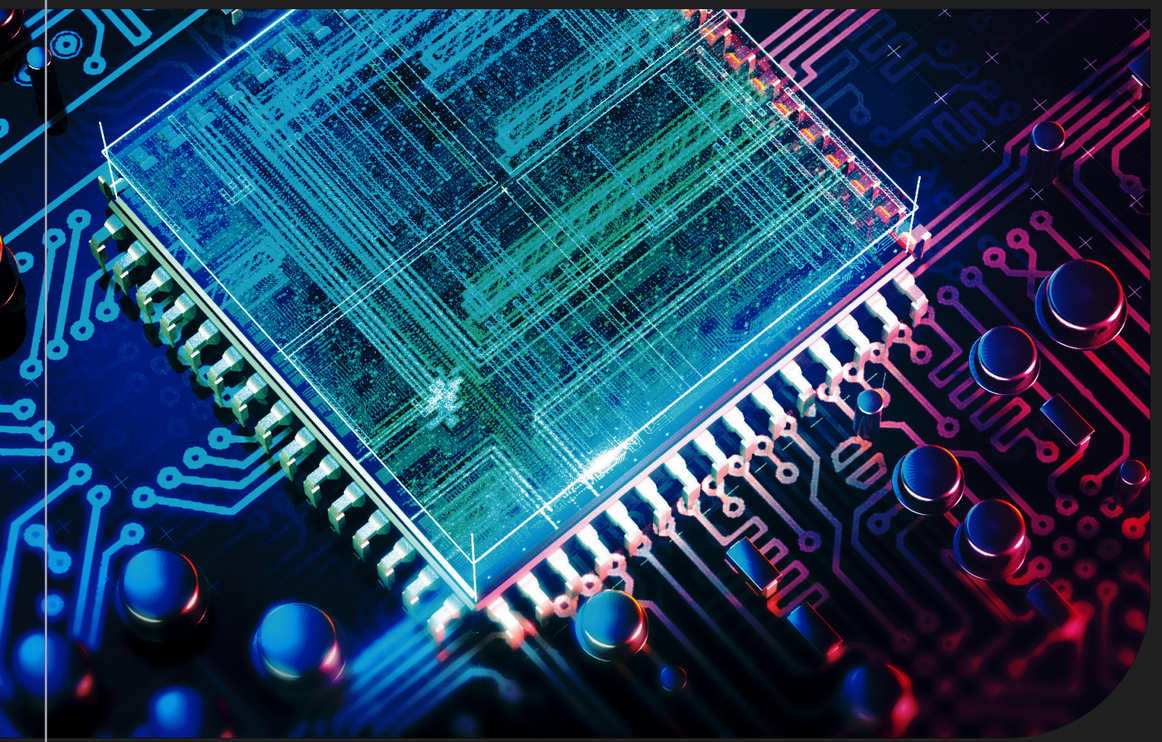
Milé používateľky a používatelia, priaznivci HPC,

bol to pre nás v **Národnom kompetenčnom centre pre HPC** a Národnom superpočítačovom centre rušný rok. Verím, že sme sa počas neho opäť priblížili o čosi bližšie k tomu, aby sme na Slovensku vybudovali aktívnu HPC komunitu – komplexný, vitálny a udržateľný ekosystém.

Prvým a dlhšie očakávaným krokom je základná obnova infraštruktúry, čo sa nám – hoci s komplikáciami – podarilo. Nový HPC systém Devana bude sprístupnený v priebehu jesene 2022, v decembri 2022 plánujeme spustiť prvú výzvu na podávanie žiadostí o prístup pre konkrétne projekty.

Na HPC sa nezabudlo ani v slovenskom Pláne obnovy a odolnosti, kde sa počíta s investíciou približne 70 miliónov Eur. Pre slovenskú vedu, výskum a inovácie je to určite dobrá správa. Je zároveň mojím hlbokým presvedčením, že potenciál tejto investície môžeme naplno využiť len vtedy, ak sa nám podarí naštartovať celonárodný HPC ekosystém a aktívne podporovať všetky jeho zložky. To bude vyžadovať spoluprácu a koordináciu mnohých partnerov na viacerých úrovniach a iste to nebude jednoduché – pre Slovensko je však najvyšší čas začať.

hpc focus

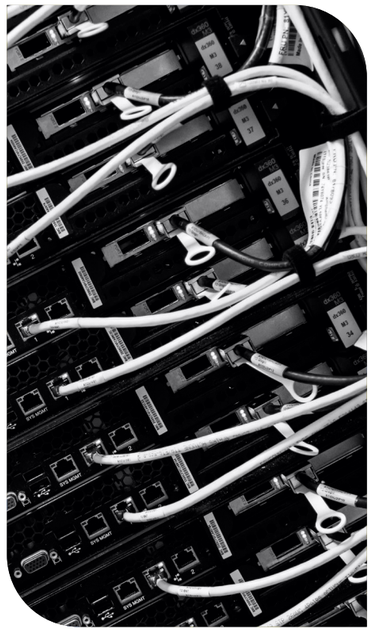


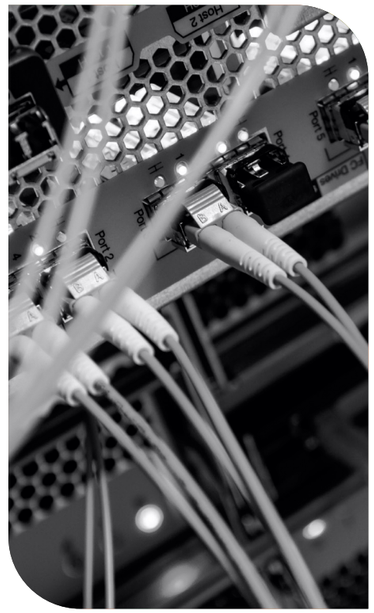
Dnes už ťažko nájsť odbor či segment, kde sa pokročilé technológie ako umelá inteligencia, spracovanie a analýza veľkých objemov dát či pokročilé simulácie neuplatnia. Zďaleka pritom nejde len o akademický výskum a vývoj, ktorý sa mnohým môže zdať vzdialený od reality. HPC je dnes omnoho dostupnejšie a čoraz častejšie ho využívajú aj súkromné firmy a verejná správa, je základom inovatívnych postupov a pokročilých digitálnych riešení, spomeňme ako príklad optimalizáciu dopravy v mestách, automatické vyhodnocovanie medicínskych snímkov, klimatické modely či digitálne dvojičky.

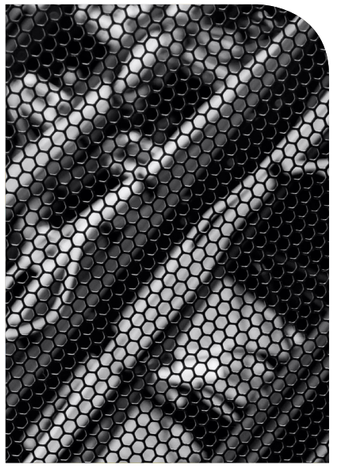
Práve rozvojom ekosystému chceme umožniť medziodborovú a medzisektorovú spoluprácu, pomôcť slovenským firmám spraviť ďalší krok v digitalizácii a podporiť ich pri vývoji a implementácii HPC riešení a v neposlednom rade vychovávať na Slovensku nových odborníkov. Nepovažujme preto investíciu do rozvoja HPC ekosystému za luxus, považujme ju za nevyhnutnosť.

Lucia Demovičová

OBSAH







Strana 04 – 19

HPC

Rozhovor s Ing. Tomášom Karáskom, Ph.D. z IT4Innovations v Ostrave, článok o platforme na spoluprácu a rozvoj HPC na Slovensku a o technických parametroch nového superpočítača DEVANA.

Strana 20 – 71

APLIKÁCIE V PRAXI

Články oslovených užívateľov superpočítača AUREL: prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc., doc. Mgr. Mariana Derzsi, PhD. a Ing. Marián Gall, PhD. či od expertov z organizácie MEMO98.

Strana 72 – 79

POPULARIZÁCIA HPC

Stať, v krorej sa dočítate o aktivitách, ktoré pre Vás pripravuje NCC, NSCC, CSČ SAV, v. v. i. – VS SAV.

Európska únia
Európsky fond regionálneho rozvoja
Operačný program Výskum a vývoj
Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR pre štrukturálne fondy EÚ
Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov ES

01

NSCC DEVANA EUROCC

hpc focus

Národné superpočítačové centrum

PLATFORMA PRE SPOLUPRÁCU A ROZVOJ HPC NA SLOVENSKU

Národné superpočítačové centrum sme predstavili v poslednom vydaní HPC Focus-u ako združenie štátneho, akademického a súkromného sektora, ktoré v novembri 2020 vzniklo s pomerne ambicióznym cieľom vybudovania mimoriadne výkonnej HPC infraštruktúry – superpočítača, ktorý by Slovensko dostal na špičku minimálne v rámci Európy. Slovensko na to využije prostriedky z Plánu obnovy a odolnosti v objeme približne 70 miliónov eur. V súčasnosti vzniká komplexná štúdia uskutočniteľnosti, na základe ktorej sa určí presná podoba a harmonogram investície.

Ak hovoríme o významnej infraštruktúre obstaranej z verejných zdrojov, právom sa očakávajú prínosy pre vedu, spoločnosť a ekonomiku kraji. Je to príležitosť zvýšiť na Slovensku znalosti a zručnosti v HPC a súvisiacich technológiách (AI/ML, HPDA, pokročilé simulácie) a docieliť, aby firmy používali viac digitálnych riešení založených na HPC, aby sme dokázali vychovať odborníkov a udržať talenty, aby slovenskí vedci a výskumníci mohli byť rovnocennými partnermi svojim európskym kolegom pri riešení komplexných problémov v rôznych odboroch.

Národné superpočítačové centrum je v aktuálne platnom Pláne obnovy a odolnosti definované ako prevádzkovateľ tejto infraštruktúry. V rámci enviromentálnej zodpovednosti a aj vzhľadom na súčasné ceny energií NSCC dôrazne navrhuje postaviť stratégiu investície na dlhodobej udržateľnosti prevádzky s čo najširším využitím zelených technológií, napríklad fotovoltaiky a využití odpadového tepla, ktoré superpočítač pri svojej prevádzke produkuje.

Či už bude mať nový superpočítač výkon desiatky alebo stovky petaflopov, je bezpochyby potrebné pripraviť naň komunitu používateľov a naštartovať podporný ekosystém. HPC infraštruktúra je jeho základom, ale samotná inštalácia a spustenie do prevádzky ani zďaleka nezabezpečia plné využitie potenciálu takejto investície. Na základe príkladov zo zahraničia (Luxemburg, Španielsko či Japonsko), ale aj z vlastnej skúsenosti vieme, že toto je možné dosiahnuť len systematickou a vytrvalou podporou odborníkov v jednotlivých aplikačných oblastiach na univerzitách a v Slovenskej akadémii vied, vývojárov softvérových nástrojov, ako aj vybudovanie expertných tímov pre podporu používateľov a siete regionálnych sprostredkovateľov. Potrebné je tiež podporovať malé a stredné podniky, veľký priemysel a verejnú správu rôznou formou od poradenstva cez grantové schémy po spoluprácu na výskumno-vývojových projektoch.

Vybudovanie HPC ekosystému na Slovensku je prirodzenou úlohou pre NSCC, ktoré sa profiluje ako národná platforma pre spoluprácu a rozvoj tejto oblasti. NSCC je zároveň plnohodnotnou inštitúciou, ktorá bude môcť jednotlivé aktivity v oblasti HPC realizovať, koordinovať ich na národnej úrovni a podieľať sa na vytváraní stratégie dlhodobého rozvoja HPC. Nebude to však robiť izolovane, ale s aktívnym zapojením svojich členov a partnerov tak, aby bola realizácia projektu postavená na spolupráci a synergiách namiesto súperenia. Zjednotená komunita NSCC, univerzít, SAV a ďalších relevantných inštitúcií je najlepším spôsobom ako do budúcnosti zabezpečiť dostatočnú váhu požiadavkám rozvoja HPC aj za horizontom Plánu obnovy a odolnosti.

Je to príležitosť zvýšiť na Slovensku znalosti a zručnosti v HPC a súvisiacich technológiách (AI/ML, HPDA, pokročilé simulácie) a docieliť, aby firmy používali viac digitálnych riešení založených na HPC, aby sme dokázali vychovať odborníkov a udržať talenty.

Nový superpočítač DEVANA

Výpočtová časť superpočítača bude pozostávať zo 140 univerzálnych výpočtových uzlov pre klasické HPC a 8 akcelerovaných uzlov pre úlohy z oblasti umelej inteligencie a strojového učenia (AI/ML).

Nový HPC systém Devana (Development and enabling), ktorý sa podarilo obstarať ako náhradu Aurela v rámci Operačného Progamu Integrovaná Infraštruktúra (OPII-2020/7/55-NP, projekt Národné kompetenčné centrum pre vysokovýkonné počítanie, kód 311071AKF2) je v pokročilom štádiu prípravy.

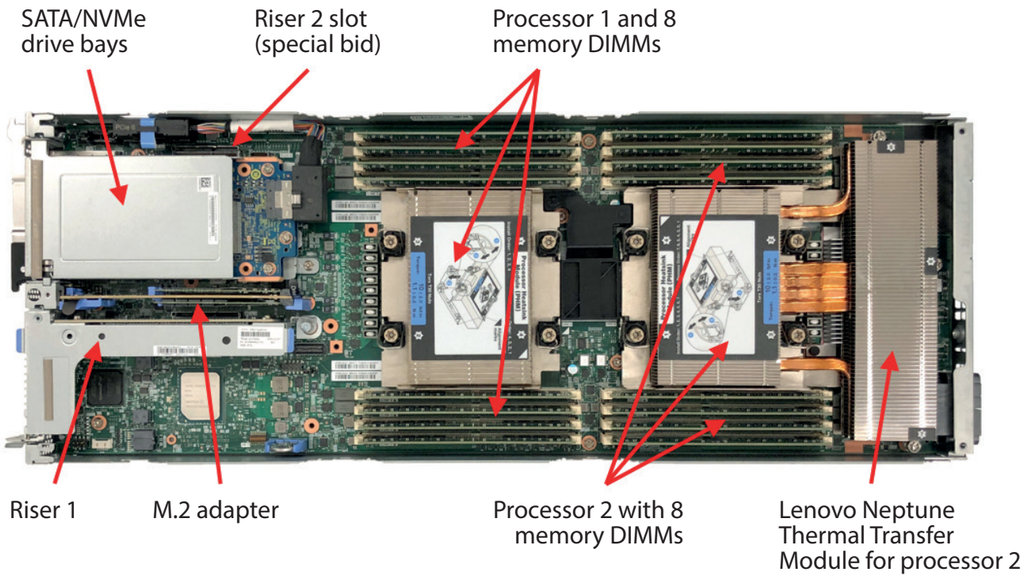
V konkurecii viacerých dodávateľov uspela technológia od firmy Lenovo. Lenovo je etablovaná spoločnosť v oblasti budovania vysokovýkonných počítačov a hoci nemá žiaden systém v prvej desiatke 500 najvýkonnejších počítačov sveta, v rámci celého zoznamu top500 (dáta z júna 2022) postavilo až 161 systémov. Náš systém síce nemá také parametre, aby sa čo i len priblížil k poslednému stroju z tohto zoznamu, bude ale isto povzbudivým navýšením v súčasnosti pomerne obmedzených domácich HPC kapacít pre akademickú komunitu. Zároveň počítame s využívaním zariadenia ďalšími komunitami používateľov zo súkromného a verejného sektora. Aj vďaka tomu sa nám podarilo do Devany zakomponovať ďalšie hardvérové platformy a tým rozšíriť portfólio problémov efektívne riešiteľných na superpočítači. Výpočtová časť superpočítača bude pozostávať zo 140 univerzálnych výpočtových uzlov pre klasické HPC a 8 akcelerovaných uzlov pre úlohy z oblasti umelej inteligencie a strojového učenia (AI/ML). K systému patrí aj nové zdieľané dátové úložisko, ktoré je klasicky rozsegmentované na 2 nezávislé časti, jedna slúžiaca na ukladanie trvalých dát používateľova a druhá na dočasné dáta generované simuláciami. Okrem toho jednotlivé výpočtové uzly disponujú lokálnymi úložiskami. Servisná časť je podobne ako to bolo v prípade Aurela nakonfigurovaná do režimu vysokej dostupnosti (všetky kritické komponenty sú zdvojené pre prípad výpadku) a patria sem uzly slúžiace na prihlásenie sa do systému a jeho správu na rôznych úrovniach. Novinkou je modul služieb pozostávajúci zo štyroch serverov, ktorého úlohou bude zabezpečovať niektoré interné, ale najmä externé služby (napr. OpenOnDemand, grafické rozhranie, špecifické služby na mieru, ...). Priestorová dispozícia superpočítača Devana ráta so šiestimi kompaktnými 42U rackmi technologického radu LeSI (Lenovo Scalable Infrastructure). V porovnaní s Aurelom je značne odlišná aj technológia chladenia prostredníctvom vodou chladených rackových dverí (tzv. nepriame vodné chladenie). Tá významne zjednodušuje údržbu a prípadnú výmenu poškodených súčiastok.

Výpočtový uzol pre HPC

Výkonovou jednotkou univerzálneho výpočtového modulu je server SD630 v2 vo formáte 0,5 U. Štyri takéto servery sú osadené v v jednej 2U jednotke DA240 (Obr. 1). Táto plarforma je optimalizovaná na maximalizáciu výkonu na jednotku plochy/objemu datacentra pri zachovaní jednoduchosti prevádzky a údržby. Samotná konfigurácia výpočtového uzla obsahuje 2 úsporné no výkonné procesory Intel Icelake 6338 32C/2.0 GHz/205 W, 256 GB operačnej pamäte a 100 Gb HDR Infiniband adaptér na pripojenie do výpočtovej siete (Obr. 2). Čo sa týka diskov výpočtové uzly sú rozdelené do dvoch kategórií podľa výkonu a kapacity lokálneho úložiska. V oboch prípadoch sa ale jedná o technológiu SSD NVMe pripojenú cez PCI express zbernicu.

OBRÁZOK 1

Štyri univerzálne výpočtové uzly Lenovo ThinkSystem SD630 v2 v jednotke DA240.



OBRÁZOK 2

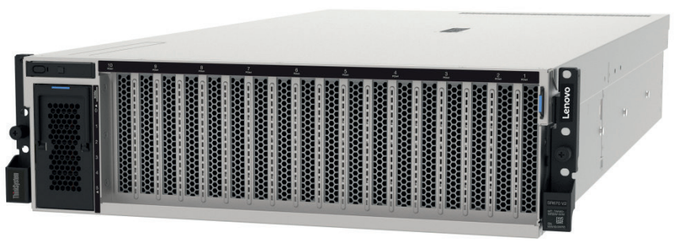
Pohľad na vnútorné rozloženie systémov výpočtového uzla SD630 v2.

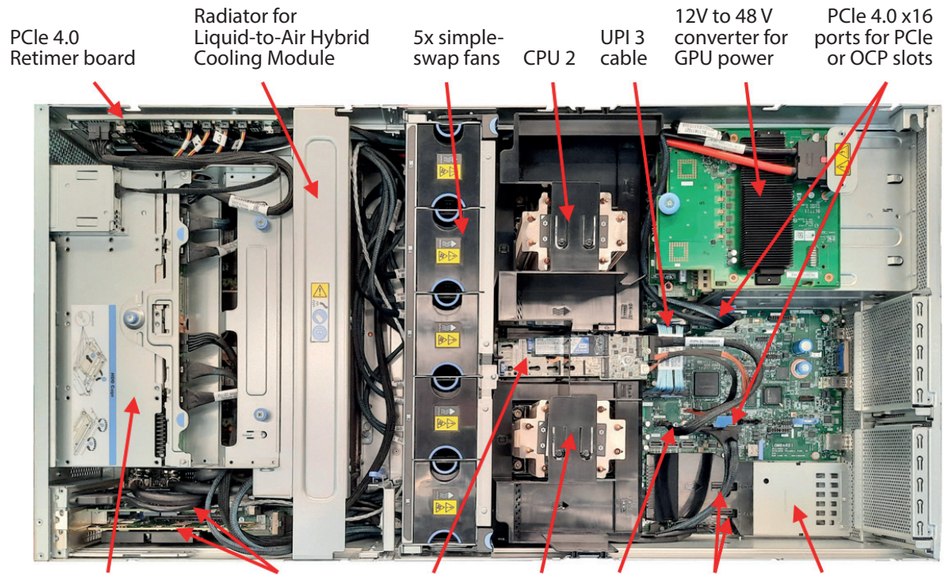
Výpočtový uzol pre AI/ML

Akcelerovaný modul nového superpočítača bude pozostávať zo serverov typu SR670 v2. S možnosťou osadenia až ôsmimi akcelerátormi typu GPGPU má samotný server výšku 3U (Obr. 3). Kôli binárnej a inštrukčnej kompatibilite majú akcelerované uzly rovnaký typ a počet procesorov ako univerzálne uzly. Takisto aj v prípade operačnej pamäte a lokálnych diskov je ich konfigurácia zhodná (Obr. 4). V porovnaní s univerzálnymi uzlami je posilnené pripojenie do výpočtovej siete na dvojnásobok teda 200 Gb/s. Výkonovou časťou uzla pre aplikácie strojového učenia a umelej inteligencie sú štyri GPGPU akceleátory Nvidia A100 40 GB vo formáte SXM (Obr. 5), prepojené medzi sebou uniformnou rýchlosťou prostredníctvom NVlink technológie. Každá karta so svojimi 6912 CUDA a 432 tenzorovými jadrami poskytuje slušný výpočtový výkon aj pre tie najnáročnejšie aplikácie z oblasti AI/ML.

OBRÁZOK 3

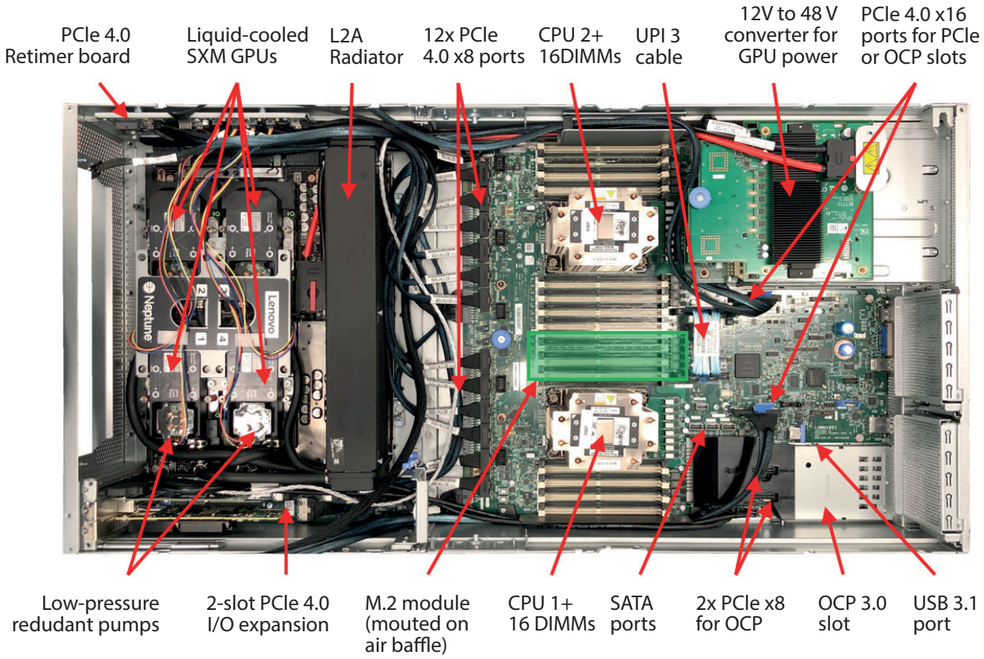
Akcelerovaný výpočtový uzol Lenovo ThinkSystem SR670 v2 s kapacitou až 8 PCIe GPGPU kariet.





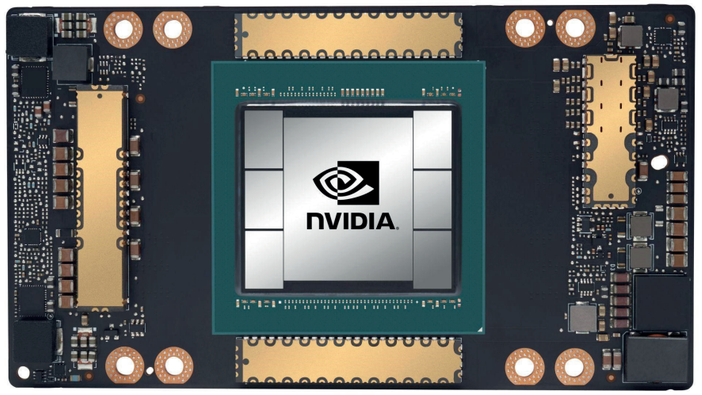
OBRÁZOK 4

Pohľad na vnútorné rozloženie systémov výpočtového uzla SR670 v2 v dvoch úrovniach.



OBRÁZOK 5

GPGPU akcelerátor Nvidia A100 vo formáte SXM.



Výpočtová sieť

Interná komunikačná sieť superpočítača určená na medziuzlovú komunikáciu a prístup k dátam na zdieľaných úložiskách je HDR infiniband (implicitné použitie technológie RDMA) s priepustnosťou 100 Gb/s a latenciou maximálne 10 mikrosekúnd. Posilnené dvojnásobné priepustnosti sú na uzly akcelerovaného modulu a servery poskytujúce prístup k dátam na zdieľaných úložiskách. Topológia tejto siete je stromová – neblokujúca sieť (t. j. blokovací pomer je 1:1). Skladá sa z dvoch vrstiev prepínačov, L1 vrstva prepínačov (tzv. "leaf" prepínače) je určená na pripojenie koncových bodov, L2 vrstva prepínačov (tzv. "spine" prepínače) prepája jednotlivé L1 prepínače navzájom.

Zdieľané dátové úložiská

Modul dátového úložiska obsahuje 2 nezávislé fyzické klastre, klaster HOME a klaster SCRATCH. Prvý je navrhnutý ako bezpečné úložisko súborov určené primárne na ukladanie trvalých dát používateľov. Je to komplexné hardvérové riešenie použiteľné na nasadenie súborového systému distribuovateľného prostredníctvom NFS protokolu (predpokladá sa použitie verzie NFSv4.0 alebo vyššej). Dva obslužné NFS servery bude možné nakonfigurovať v active-active alebo active-passive móde. SCRATCH je výkonné úložisko súborov určené pre krátkodobé skladovanie dočasných dát generovaných počas behu úloh. Finálna konfigurácia zahŕňa 2 metadata servery a 4 dátové servery (V prípade Aurela boli dáta a metadáta distribuované rovnomerne cez všetky dátové servery). Na úrovni súborového systému je použité „open source" riešenie BeeGFS, umožňujúce v prípade potreby bezproblémové navýšenie šírky pásma pridaním ďalších dátových serverov.

SPUSTENIE PRVEJ GRANTOVEJ SÚŤAŽE PRE PROJEKTY JE NAPLÁNOVANÉ V DECEMBRI 2022.

TABUĽKA

Porovnanie technických parametrov superpočítača AUREL s jeho nástupcom – superpočítačom DEVANA.

	AUREL	DEVANA
PLATFORMA	IBM Power 775	Lenovo ThinkSystem SD630 v2 + SR670 v2
OS	AIX 7.x	CentOS 7.x
ARCHITEKTÚRA	Power7	x86_64
CPU UZLY	122	140
GPU UZLY	0	8
CPU JADRÁ	4096	9472
GPU JADRÁ	0	221184 CUDA + 13824 Tensor
TEORETICKÝ VÝKON	~130 TFlops	~800 TFlops
RAM	32 TB	38 TB
DÁTOVÉ ÚLOŽISKÁ	600 TB + 300 TB	1 PB + 600 TB + 400 TB
SÚBOROVÝ SYSTÉM	GPFS	BeeGFS + Linux native
VÝPOČTOVÁ SIEŤ	IBM HFI Interconnect	HDR Infiniband
TOPOLÓGIA SIETE	Fat tree (neblokujúca)	Fat tree (neblokujúca)
PRÍKON	220 kW	130 kW

NÁRODNÉ KOMPETENČNÉ CENTRUM PRE HPC V ČESKEJ REPUBLIKE

O spolupráci s mimoakademickými subjektmi v oblasti HPC a fungovaní kompetenčného centra v Českej Republike sme sa rozprávali s Tomášom Karáskom z IT4Innovations v Ostrave.

Na úvod nám môžete povedať niečo o českom kompetenčnom centre – koľko partnerov je zapojených a aký veľký je váš tím?

Národné kompetenčné centrum (NCC) pre HPC v rámci EuroHPC Joint Undertaking je v Českej republike zastúpené IT4Innovations – národným superpočítačovým centrom pri Vysokej škole Banskej v Ostrave. Na aktivitách kompetenčného centra sa podieľa viac ako 45 pracovníkov (20 FTE) z čoho väčšinu (35) tvoria vedeckí, respektíve technickí pracovníci.

Mali ste v Českej republike predchádzajúce skúsenosti s poskytovaním HPC služieb neakademickým používateľom ešte pred spustením projektu EuroCC? (Projekt bol spustený v septembri 2020.)

IT4Innovations dlhodobo spolupracuje s partnermi z priemyslu a to nielen z radov malých a stredných podnikov. V priebehu viac ako desiatich rokov sme spolupracovali s desiatkami firiem naprieč priemyselnými odvetviami. Naša spolupráca zahŕňa prenájom výpočtových kapacít, zmluvný výskum a najmä spoločný výskum v rámci národných a medzinárodných projektov.

Ktoré služby z vášho portfólia patria k najžiadanejším?

IT4Innovations ponúka svojim partnerom z priemyselnej praxe dlhoročné skúsenosti v oblastiach náročných numerických simulácií, virtuálneho prototypovania a náročných dátových analýz.

Našim partnerom ponúkame realizáciu simulácií fyzikálnych procesov v oblastiach prúdenia tekutín, štrukturálnej mechaniky, prenosu tepla, akustiky a elektromagnetizmu. Na riešenie týchto problémov využívame nielen komerčné programové balíky ako ANSYS Multiphysics, Fluent, CFX, Comsol Multiphysics, ale aj nekomerčné open source balíky, napr. OpenFOAM atď.

Ponúkame taktiež vývoj automatizovaných, na mieru šitých výpočtových nástrojov založených na open source produktoch tretích strán, akými sú OpenFOAM, Code_Saturne, Code_Aster, Elmer alebo Calculix. Tieto balíky sme schopní upraviť tak, aby ich bolo možné používať na riešenie konkrétneho problému úplne automaticky, s minimálnymi požiadavkami na užívateľa. Ďalej sme schopní na základe požiadaviek vytvoriť kompletnú metodiku riešenia daného problému s využitím open source produktov. Toto umožní firmám používať takéto open source produkty pri svojich R&D aktivitách.

V oblasti náročných dátových analýz sa IT4Innovations venuje spracovaniu a analýze rozsiahlych dát a simuláciám, ktoré máju rôzne využitie v reálnom živote. Ide napríklad o podporu riadenia a rozhodovania v mimoriadnych situáciách, inteligentné navigácie, predikcie zaťaženia prevádzky, modelovanie šírenia záplav, inteligentné mestá, bioinformatiku a analýzy spoľahlivosti. Ďalej sa zaoberáme oblasťou programových modelov pre distribuované aplikácie a ich efektívnou realizáciou.

Mohli by ste spomenúť niektoré úspešné spolupráce s MSP a priemyslom?

Z veľkého počtu úspešných projektov stojí za zmienku spolupráca s firmou Siemens s. r. o. spočívajúca v spoločnom vývoji optimálneho návrhu ventilačného uzla zaisťujúceho efektívne

Ing. Tomáš Karásek, Ph.D. pôsobí ako vedúci Laboratória vývoja paralelných algoritmov v spoločnosti IT4Innovations v Ostrave.

chladenie asynchrónneho elektromotora: https://www.it4i.cz/spoluprace-s-prumyslem/priklady-spoluprace/optimalizace-ventilacniho-uzlu-asynchronniho-elektromotoru, ktorá následne pokračovala v rámci projektu "Digitálne dvojča produktu v rámci výrobných závodov Siemens" podporeného grantom ministerstva priemyslu a obchodu.

Medzi úspešné spolupráce s MSP je možné uviesť projekty s firmami Viderize alebo Orgrez.

Viderize

https://www.it4i.cz/spoluprace-s-prumyslem/priklady-spoluprace/zefektivneni-vysetreni-sitnice

Spoločný projekt „Vývoj expertného systému pre automatické vyhodnocovanie patológií zo snímky oka" podporený Technickou Agentúrou Českej Republiky (TAČR) s cieľom vyvinúť a overiť expertný systém využívajúci modelovanie a trénovanie neurónových sietí pre detekciu patológií súvisiacich s diabetickou retinopatiou nad snímkami zhotovenými tzv. fundus kamerou. Neurónové siete sú trénované pre klasifikáciu a segmentáciu snímok z fundus kamier, tj. rozdelenie snímok do kategórií určujúcich stupeň závažnosti choroby vrátane detailnej segmentácie špecifických defektov, ktoré s jednotlivými stupňami súvisia. Na tréning a validáciu sa využívajú tisícky snímok vo vysokom rozlíšení, čo kladie vysoké nároky na výpočtový výkon. Pre projekt boli využívané špecializované akcelerované systémy na výpočty umelej inteligencie ako je superpočítač Barbora či NVIDIA DGX-2.

Orgrez

https://www.it4i.cz/spoluprace-s-prumyslem/priklady-spoluprace/vypocetni-simulace-pro-snizovani-emisi-ve-spalovacich-zarizenich

Na začiatku spolupráce s firmou ORGREZ stál tzv. Proof-of-concept (PoC) v rámci projektu EuroCC. Tento PoC mal za cieľ overiť možnosti numerického modelovania, konkrétne tzv. Computational Fluid Dynamics (CFD) pre riešenie procesu selektívnej katalytickej redukcie (SCR). Na základe výstupov tohto PoC bol podaný a podporený spoločný projekt do výzvy Ministerstva priemyslu a obchodu s cieľom vytvoriť softvérový nástroj pre efektívne hodnotenie katalytických procesov a komplexnú podporu pri návrhu SCR technológií pre priemyselné aplikácie.

Na Slovensku je pomerne náročné angažovať organizácie verejného sektora. Aký je podľa vašich skúseností najefektívnejší spôsob zapojenia tejto skupiny stakeholderov a aké výzvy v tomto smere považujete za najvýznamnejšie?

V Českej republike nie je veľa organizácií štátnej správy, ktoré by využívali možnosti vysokovýkonného počítania. Toto je možné prisúdiť jednak nižšiemu povedomiu o možnostiach využitia HPC, ale aj nedostatkom zamestnancov týchto inštitúcií so zodpovedajúcimi znalosťami a skúsenosťami. Z nášho pohľadu sa ako najefektívnejší spôsob ako zvýšenia využitia HPC touto cieľovou skupinou javí aktívne vyhľadávanie potenciálnych partnerov a zvyšovanie povedomia o HPC s využitím príkladov dobrej praxe ako sú systém Floreon+ (https://floreon.eu/mapa/) slúžiaci na vyhodnocovanie informácií pre podporu rozhodovania v rámci procesov krízového riadenia, najmä povodní a to predovšetkým so zameraním na oblasť Moravsko-sliezskeho kraja. Ďalšími príkladmi sú spolupráca s Fakultnou nemocnicou v Ostrave pri spracovaní lekárskych snímok https://www.it4i.cz/spoluprace-s-prumyslem/priklady-spoluprace/zpracovani-lekarskych-snimku-jako-sluzba alebo spolupráca s Moravskoslezským krajom a mestom Ostrava pri vybudovaní veľkokapacitného očkovacieho centra, ktoré bolo sprevádzkované v marci 2021 v ostravskej Černé louce.

V prípade spolupráce so štátnou správou patrí medzi najväčšie výzvy práve zvýšenie počtu používateľov a tiež aj vhodných prípadových štúdií z tohto segmentu.

Ktoré kompetencie alebo činnosti by sa podľa vás mali pridať do portfólia kompetenčných centier aby mohli efektívnejšie plniť svoju úlohu, najmä s ohľadom na ich udržateľnosť?

Vzhľadom na rozdielnu úroveň jednotlivých kompetenčných centier a najmä vzhľadom na rozdielne potreby komunít v jednotlivých krajinách je veľmi ťažké určiť nejakú všeobecnú kompetenciu, ktorú by mali kompetenčné centrá zaviesť do svojho portfólia služieb.

V oblasti náročných dátových analýz sa IT4Innovations venuje spracovaniu a analýze rozsiahlych dát a simuláciám, ktoré máju rôzne využitie v reálnom živote.

Potreba tzv. „tvrdých“ kompetencií je vo svojej podstate definovaná potrebami HPC používateľov v konkrétnej krajine. Na druhej strane by potrebné „mäkké“ kompetencie mali reflektovať potreby daného ekosystému do ktorého patria napríklad inovačné centrá, digitálne inovačné huby, európske digitálne inovačné huby, odborové klastre atď.

Budúca udržateľnosť národných kompetenčných centier vzhľadom na ich povahu a poslanie bude závisieť najmä od financovania z verejných prostriedkov, s najväčšou pravdepodobnosťou sa bude musieť jednať o kombináciu národných a európskych zdrojov. Nie je reálne, aby vzhľadom na súčasnú úroveň využitia HPC technológií medzi MSP boli národné kompetenčné centrá financované iba z príjmov získaných z poskytovaných služieb.

Nie je reálne, aby vzhľadom na súčasnú úroveň využitia HPC technológií medzi MSP boli národné kompetenčné centrá financované iba z príjmov získaných z poskytovaných služieb.

Mali ste nejaké problémy s náborom a/alebo udržaním kvalifikovaných zamestnancov pre prácu vo vašom Kompetenčnom centre?

V súčasnosti sú do aktivít NCC zapojení zamestnanci IT4Innovations, ktorí sa priebežne angažujú podľa potreby. Avšak získanie nových posíl nie je jednoduché. Vyplýva to z vyšších nárokov na kompetencie a skúsenosti v danej oblasti a tiež z faktu, že na trhu práce je vysoký dopyt po takýchto kandidátoch mnohonásobne prevyšúci ponuku. Vzhľadom na to, že IT4Innovations, resp. NCC funguje v rámci vysokej školy je veľmi náročné konkurovať ponukám zo súkromného sektora aj čo sa týka finančného ohodnotenia.

Karolina

Petascalový systém Karolina bol zhotovený v rámci celoeurópskeho spoločného podniku EuroHPC a inštalovaný v roku 2021. Tento systém sa radí medzi najvýkonnejšie HPC systémy v Európe. V rebríčku TOP500, ktorý sleduje superpočítače z hľadiska ich výkonnosti, sa v roku 2021 celosvetovo umiestnil na 69. pozícii, v Európe drží 19. priečku a v rebríčku Green500 energeticky najúčinnejších superpočítačov obsadil skvelé 8. miesto.

Nový superpočítač dosahuje teoretický výpočtový výkon 15,7 PFlop/s, čo znamená, že zvládne 15,7 biliard operácií za sekundu.

02

APLIKÁCIE V PRAXI

hpc focus

Profesor
Roman Martoňák

TLAK
HMOTA
POČÍTAČ

Prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc. pôsobí na Katedre experimentálej fyziky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky UK ako vysokoškolský pedagóg.

V našom príspevku priblížime fascinujúcu a v širokej verejnosti pomerne málo známu problematiku fyziky vysokých tlakov. Náš bežný život prebieha pri atmosférickom tlaku a preto sa v ňom častejšie stretávame so zmenami spôsobenými teplotou (topenie tuhých látok alebo var kvapalín). Vysoký tlak však dokáže v hmote spôsobiť oveľa dramatickejšie zmeny ako teplota. Známym príkladom je premena mäkkého grafitu na supertvrdý diamant, ktorá našla praktické využitie pri výrobe umelých diamantov. Vo vnútri Zeme a planét sa vyskytujú obrovské tlaky (až miliónykrát vyššie, ako atmosférický tlak) a pre pochopenie toho, čo sa tam deje, potrebujeme vedieť, ako tlak a teplota menia štruktúru hmoty. Nedávno bolo ukázané, že pri tlaku 1 – 2 milióny atmosférických tlakov dokonca môže existovať supravodivosť (vedenie elektrického prúdu bez strát) pri izbovej teplote. Okrem experimentov, ktoré sú komplikované, sa dnes procesy pri vysokých tlakoch dajú veľmi efektívne skúmať pomocou počítačových simulácií. Tieto nám umožňujú nahliadnuť do vnútra kryštálov a aj priamo sledovať, ako sa atómy preskupujú pod vplyvom vysokého tlaku. V súčasnej dobe tieto metódy prechádzajú etapou búrlivého rozvoja.

01 Skoky, ktorým hovoríme fázové prechody

Na úvod začneme trochu z iného konca, kde nám pomôže naša bežná každodenná skúsenosť. Keď vidíme topiaci sa sneh, zdá sa nám, že ide o niečo tak bežné, že ani nemá zmysel nad tým rozmýšľať. Každý vie, že ľad sa pri teplote 0 °C topí a premení sa na tekutú vodu. Pritom otázok, ktoré by nám pritom mohli napadnúť, je viac než dosť, a začneme tými najdôležitejšími. Prírodné zákony sú spojité, a preto sa zdá nám prirodzené, že malá príčina obvykle vyvoláva malý následok. Ale prečo potom pri topení nevzniká najprv niečo, čo by bolo trochu ľad a trochu voda? Prečo aj pri nepatrnom zvýšení teploty nad 0 °C nastáva taká radikálna premena? Zdá sa, ako keby v prípade topenia spojitosť nefungovala, pretože vidíme skokovú zmenu. Ako je to možné? Samozrejme, na strednej škole sa učí, že topenie kryštálu (v tomto prípade ľadu) je príkladom tzv. fázového prechodu, alebo, ako sa skôr hovorilo, skupenskej premeny. Nie je to špecifickou vlastnosťou vody a pozoruje sa to prakticky pri všetkých látkach. Ale to, že jav nejako nazveme, ešte nie je jeho vysvetlením. Ako sa teda topenie dá vysvetliť z pohľadu fyziky?

Pre odpoveď potrebujeme dôležitú časť fyziky, ktorá sa volá štatistická mechanika. Hovorí nám, že pri daných vonkajších podmienkach sa realizuje najpravdepodobnejší stav systému. Pravdepodobnosť existencie vody a ľadu závisí od teploty. To, čo sa deje pri teplote 0 °C, je jednoducho výmena týchto pravdepodobností – pod 0 °C je ľad pravdepodobnejší, ako voda, a nad 0 °C je to naopak.

Nedávno bolo ukázané, že pri tlaku 1 – 2 milióny atmosférických tlakov dokonca môže existovať supravodivosť (vedenie elektrického prúdu bez strát) pri izbovej teplote.

Zhruba sa dá povedať, že až tisíce atmosférických tlakov začínajú predstavovať hodnoty zaujímavé pre prípravu nových kryštalických štruktúr.

Jednoduchý princíp – najpravdepodobnejší stav vyhráva - dokáže všeobecne a prirodzene vysvetliť existenciu skokovej zmeny, alebo fázového prechodu. Dalo by sa to prirovnať k modelovej situácii z ekonómie, kde by sa kupujúci pri kúpe určitého produktu rozhodovali len podľa ceny, pričom by existovali iba dva druhy produktu, A a B. Pokiaľ je cena A nižšia ako cena B, všetci budú kupovať A. Ale ak B zlacnie a jeho cena sa dostane aspoň tesne pod A, všetci budú kupovať B. Malá zmena cien spôsobila dramatickú zmenu správania.

Po tejto úvodnej príprave môžeme prejsť od teploty k tlaku. Princíp je podobný a nemalo by prekvapiť, že aj tlak vyvoláva nespojité zmeny. Ale tlak dokáže v istom zmysle viac. Teplota zo svojej podstaty vyvoláva chaos a posúva systém smerom k neusporiadanosti. Preto pri topení zanikne usporiadaný kryštál, kde atómy majú presne definovanú polohu, a nahradí ho oveľa menej usporiadaná kvapalina, kde každý atóm môže byť všade. Na rozdiel od teploty však tlak nevyvoláva chaos, len posúva systém smerom k menšiemu objemu. Preto tlak typicky spôsobuje premenu jednej usporiadanej kryštalickej štruktúry na inú, ktorá má menší objem. Objem je daný tým, ako blízko sú atómy poukladané. Čím vyšší je tlak, tým dôležitejšie je znížiť objem, a tým „lepšie“ sa musia atómy poukladať.

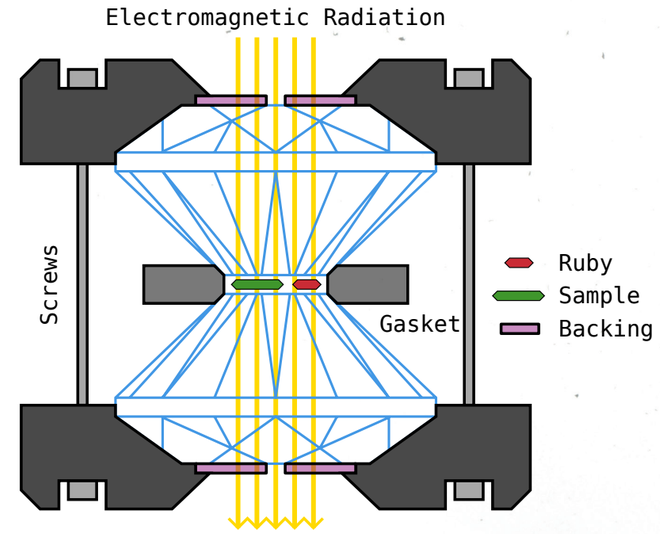
02 Nový svet nad atmosférickým tlakom

Premena grafitu na diamant a 18 foriem ľadu

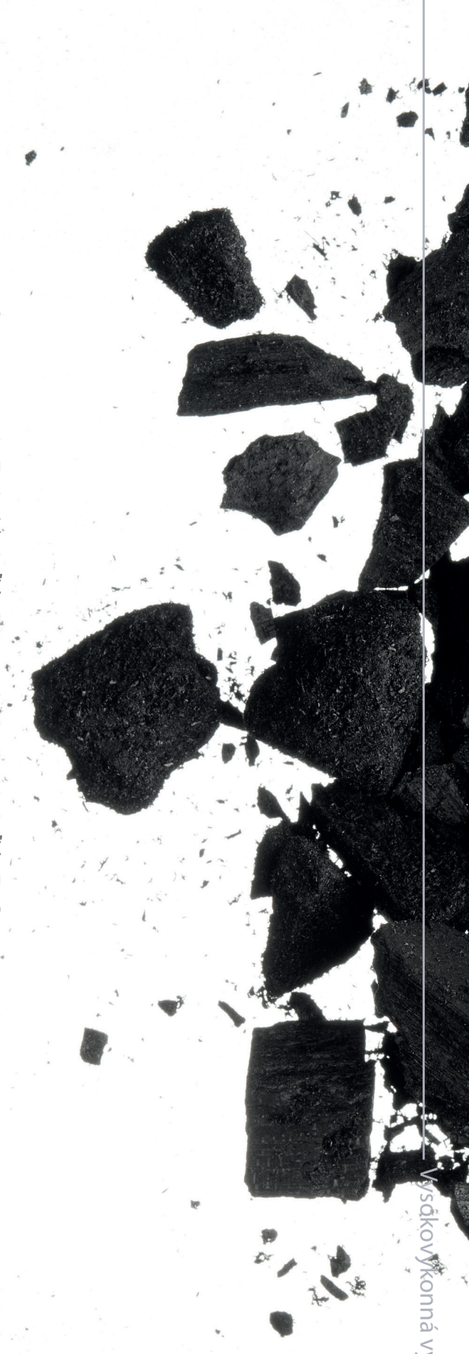
V tomto momente treba upresniť, čo pre nás znamená vysoký tlak. V bežnom živote sa stretávame s vyššími tlakmi napr. pri varení v tlakovom hrnci alebo pri hustení pneumatík. Takéto tlaky sú z pohľadu kryštálov pomerne nízke a preto nezaujímavé. Zhruba sa dá povedať, že až tisíce atmosférických tlakov začínajú predstavovať hodnoty zaujímavé pre prípravu nových kryštalických štruktúr. Pri tlakoch dosahujúcich milióny atmosférických tlakov už zmenia štruktúru takmer všetky látky.

Je fascinujúce, že takéto extrémne tlaky dnes vieme v laboratóriu pomerne jednoducho dosiahnuť. Príbeh sa začal v r. 1905, keď sa americký fyzik P. Bridgman rozhodol systematicky skúmať, čo sa stane s rôznymi materiálmi po ich stlačení. Za svoju pioniersku činnosť v tejto oblasti bol v r. 1946 ocenený Nobelovou cenou za fyziku. Tlak je sila na jednotku plochy a preto cesta k vysokému tlaku vedie cez veľkú silu pôsobiacu na malej ploche. V súčasnosti je najpoužívanejšou metódou tzv. diamantová komôrka (DAC – diamond anvil cell, Obr. 1), v ktorej sa skúmaná vzorka nachádza medzi dvoma špicatými diamantmi, ktoré ju stláčajú. V tejto komôrke sa samozrejme nachádza len veľmi malé množstvo vzorky, avšak pomocou inentzívneho elektromagnetického žiarenia (od infračerveného až po röntgenovské) je možné priamo skúmať jej štruktúru a fyzikálne vlastnosti (najčastejšie sa to robí na tzv. synchrotrónoch).

Reálna možnosť dosiahnutia takýchto vysokých tlakov v laboratóriu otvára nový svet. Tlak cez zmenšovanie objemu zásadným spôsobom mení štruktúru a chemické väzby. Následkom toho sa potom zmenia všetky vlastnosti hmoty – hustota, tvrdosť, farba, vodivosť, magnetické vlastnosti, atď. z polovodičov sa typicky stávajú kovy (napr. kremík), ale môže to byť aj naopak – napr. kovový sodík sa zmení na izolant. Existencia určitej látky v rôznych kryštalických formách sa označuje ako polymorfizmus.

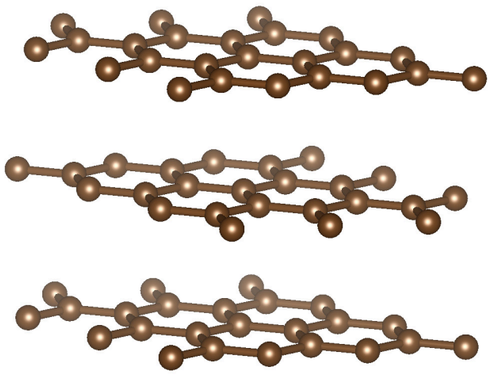


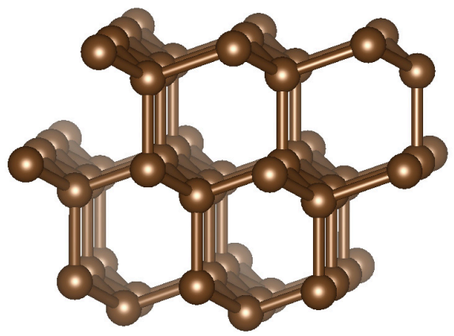
Prototypom štruktúrneho prechodu pri vysokom tlaku je prechod grafit – diamant v uhlíku (Obr. 2). Pri pôsobení vysokého tlaku (a pomáha aj vysoká teplota) nastane prepojenie susedných grafénových vrstiev, ktoré tvoria grafit. Po vytvorení pevných väzieb aj v smere kolmom na roviny vznikne



OBRÁZOK 1

Diamantová komôrka (obrázok z Ref. [1]).





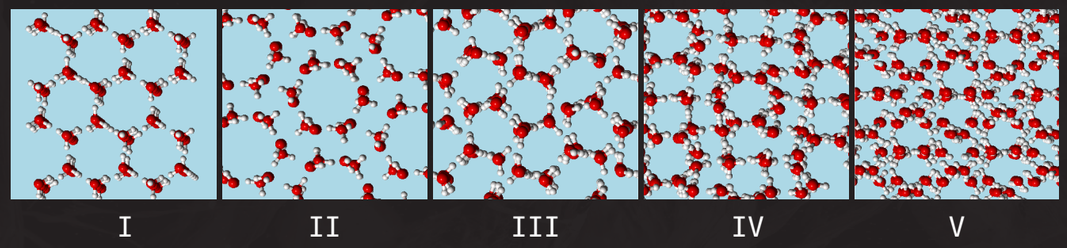
grafit diamant

OBRÁZOK 2

Grafit (obrázok z Ref. [2]) a diamant (obrázok z Ref. [3]) (hore) a ich kryštálová štruktúra (dole).

z mäkkého čierneho grafitu priesvitný a lesklý diamant, ktorý predstavuje najtvrdší materiál, aký sa vyskytuje v prírode. Zmena vlastností pri tomto prechode je naozaj extrémna (a dramaticky sa mení aj cena).

Aby sme ostali pri látkach známych z bežného života, veľmi zaujímavým príkladom bohatého polymorfizmu je tiež ľad. Forma, ktorú dobre poznáme, chladíme ňou nápoje a lyžujeme sa na nej, je tzv. hexagonálny ľad I_h. Názov sa odvíja od šesťuholníkov, ktoré sú chrakteristické pre jeho štruktúru. Ale okrem tejto formy existuje ďalších najmenej 17 foriem, ktoré majú úplne odlišnú štruktúru (Obr. 3), a dokonca aj najmenej dve neusporiadané tuhé formy (tzv. amorfné). Medzi nimi má výnimočne komplikovanú a exotickú štruktúru napr. ľad V, ktorý sa vyskytuje pri tlaku 5000 atmosférických tlakov a teplote -20 °C.



Skôr než prejdeme k ďalším témam, nemôžeme aspoň nespomenúť, že asi najzaujímavejším príkladom je hľadanie kovového vodíka pri extrémnych tlakoch (takmer 5 miliónov atmosférických tlakov). Napriek tomu, že ide o najjednoduchší prvok v periodickej tabuľke, je to dlhý, zložitý a napínavý príbeh, ktorý trvá už takmer 100 rokov. Zdá sa, že v posledných rokoch tento príbeh smeruje k šťastnému koncu, ale to by bola téma na samostatný článok.

OBRÁZOK 3

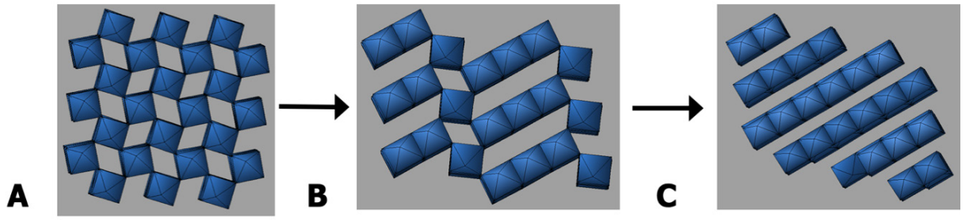
Ukážka niektorých dôležitých štruktúr ľadu. Bežný hexagonálny ľad I_h je prvý zľava. Červený atóm predstavuje kyslík a biely vodík.

03 Vyskytujú sa také vysoké tlaky aj v prírode?

Geofyzika a planetárna fyzika

Keby sa vysoké tlaky vyskytovali len v laboratóriu, celá problematika by predstavovala skôr akademický problém. Príroda sa však vysokým tlakom nevyhýba. Ak by sme si predstavili cestu do stredu Zeme, o akej sníval Jules Verne, vystavili by sme sa obrovským tlakom. Tlak v strede Zeme, v jej kovovom jadre, je cca 3,6 milióna atmosférických tlakov. Ešte pred kovovým jadrom by sme stretli rôzne (silne stlačené) minerály, ktoré v určitej hĺbke, kde tlak prekročí

určitú hodnotu, menia svoju formu. Takto vznikne rozhranie, na ktorom sa odrážajú a lámu seizmické vlny a práve tieto nám umožňujú takéto zmeny štruktúry v hĺbke našej planéty „vidieť“.



OBRÁZOK 4

Prechod z perovskitu (A) na postperovskit (C) cez medzištruktúru (B) [6].

Známym príkladom je tzv. vrstva D'' v hĺbke cca 2700 km pod povrchom Zeme, kde sa mení štruktúra minerálu $MgSiO_3$ z perovskitu na tzv. post-perovskit. Tento fázový prechod bol experimentálne objavený dvoma skupinami v r. 2004 [4,5] a prirodzene vysvetlil seizmickú anomáliu pozorovanú v spomínanej hĺbke. Tento objav nás však už privádza aj k teórii, pretože tento prechod bol krátko nato vysvetlený [6] pomocou metódy, na vývoji ktorej sa podieľal autor tohoto článku.

04 Prečo má vlastne kryštál danú štruktúru? Vieme ju predpovedať?

Cieľom vedy je pochopenie javov a vypracovanie teórie, ktorá dokáže predpovedať. Teóriou je v tomto prípade termodynamika a tá nám hovorí, že problém určenia štruktúry kryštálu pri danom tlaku je v skutočnosti problémom nájdenia takého usporiadania atómov v priestore, ktoré dáva najnižšiu možnú hodnotu určitej funkcie, ktorú možno vypočítať. V matematike je tento typ problémov dobre známy a označuje sa ako tzv. optimalizačný problém. Je tiež známe, že jeho riešenie je často veľmi komplikované. Ešte pred cca 30 rokmi bol tento problém pre kryštály dokonca považovaný za prakticky neriešiteľný. Dobre to charakterizuje známy výrok J. Maddoxa, ktorý bol v r. 1988 editorom prestížneho časopisu Nature: „One of the continuing scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from a knowledge of their chemical composition.“ [7] Bolo pritom zrejmé, že význam vyriešenia tohto fundamentálneho problému je značný. Ak by sme vedeli teoreticky predpovedať štruktúru materiálu skôr, než ho v laboratóriu pripravíme, mohli by sme „dizajnovať materiály v počítači“, vypočítať ich vlastnosti a potom sa pokúsiť tie najlepšie vyrobiť. To predstavuje úplný opak tradičného hľadania nových vlastností náhodným skúmaním veľkého množstva materiálov. Ale akokoľvek dobre to znie, na tento zázrak bolo v r. 1988 treba ešte pár rokov počkať.

Ak by sme vedeli teoreticky predpovedať štruktúru materiálu skôr, než ho v laboratóriu pripravíme, mohli by sme “dizajnovať materiály v počítači”.

05 Riešenie neriešiteľného problému v r. 2006

Ak je problém považovaný za veľmi ťažký, tak sa málokomu chce ho riešiť, lebo každý vie, že sa to „nedá“. V r. 2006 sa však objavili 2 články využívajúce rôzne matematické algoritmy ako priame hľadanie [8] a evolučné hľadanie [9], ktoré presvedčivo ukázali, že problém je v skutočnosti ľahší, než sme si dovtedy mysleli (nestáva sa to často, ale vždy to poteší). Trochu zjednodušene povedané, stačí náhodne vygenerovať dostatočné množstvo usporiadaní atómov, „učesať“ ich a vybrať v istom zmysle „to najlepšie“. Problém by samozrejme mohol byť v tom, koľko je „dostatočné

V r. 1911 holandský fyzik Kamerlingh Onnes objavil supravodivosť, čiže bezstratové vedenie elektrického prúdu (odpor úplne zanikne), za čo bol ocenený Nobelovou cenou za fyziku v r. 1913.

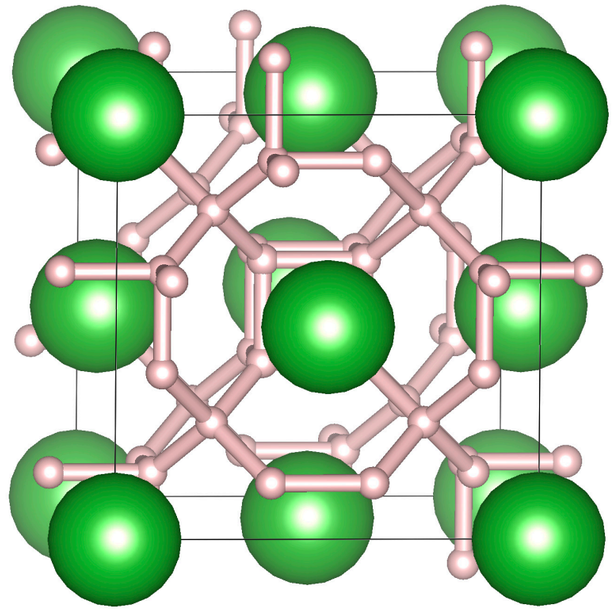
množstvo“. V tomto prípade to však našťastie nie je astronomické číslo, pretože obvykle stačí niekoľko tisíc až desiatok tisíc. V evolučných algoritmoch si pomáhame tiež „krížením“ štruktúr, čo je inšpirované biologickou evolúciou (vezmeme kúsok z jednej a kúsok z druhej, a nejako ich „zlepíme“). Metódy fungujú tak dobre, že bez zveličovania ich možno považovať za revolúciu v danej oblasti.

06 Predikcia kryštálových štruktúr pomocou počítačov

Virtuálna cesta do nového sveta

Samozrejme, to, že sa nám problém dnes javí ako pomerne ľahký, je do značnej miery spôsobené veľkou „hrubou silou“ súčasných počítačov (teda ich vysokým výpočtovým výkonom). Nájsť štruktúru bežných kryštálov je možné na výkonnom PC typicky v priebehu niekoľkých dní. Pri nasadení paralelných superpočítačov je možné v krátkom čase nájsť aj komplikované štruktúry. Je dokonca možné optimalizovať aj pomery zastúpenia prvkov v zlúčenine (tzv. stechiometriu). Môže sa to zdať prekvapujúce, ale aj toto závisí od tlaku. Každý vie, že napr. kuchynská soľ, chlorid sodný NaCl, vzniká zlúčením sodíka a chlóru v pomere 1:1. To však platí len pri nízkom tlaku. V r. 2013 bolo ukázané, že pri vysokom tlaku sú prekvapujúco stabilné exotické zlúčeniny Na3Cl, Na2Cl, Na3Cl2, NaCl3 a NaCl7 [10].

Pre ilustráciu spomenieme jednu z nedávnych fascinujúcich predpovedí. V r. 1911 holandský fyzik Kamerlingh Onnes objavil supravodivosť, čiže bezstratové vedenie elektrického prúdu (odpor úplne zanikne), za čo bol ocenený Nobelovou cenou za fyziku v r. 1913. Tento pozoruhodný jav sa však typicky vyskytuje pri nízkych teplotách a už vyše 100 rokov je preto snom fyzikov nájsť materiál, ktorý by bol supravodivý pri izbovej teplote. Na to sa ideálne hodia práve spomínané výpočtové metódy. V r. 2017 sa podarilo teoreticky predpovedať materiál LaH10 (nezávisle dve skupiny [11,12]), ktorý by mal byť supravodivý pri teplote viac ako 270 K, čiže okolo 0 °C. Nie je to zadarmo, pretože k tomu potrebuje obrovský tlak vyšší než 2 milióny atmosférických tlakov. Štruktúra je zobrazená na Obr. 5 a posúdenie jej estetických kvalít prenechávame čitateľovi. Materiál bol úspešne pripravený presne podľa predpovede a dve skupiny [13,14] v r. 2019 nezávisle ukázali, že pri spomínanom tlaku je skutočne supravodivý pri teplote vyššej ako 260 K, čiže -13 °C. Predpoveď a jej potvrdenie možno označiť za triumf teoretickej predpovede kryštálových štruktúr. K praktickému využitiu je zatiaľ ďaleko, ale už vieme, že supravodivosť pri izbovej teplote je možná.



OBRÁZOK 5

Štruktúra vysokoteplotného supravodiča LaH_{10} [11,12]. Atómy vodíka sú ružové so znázornenými väzbami a atómy lantánu sú zelené..

07 Návrat z „nového sveta“

Nakoniec sa nemôžeme vyhnúť prirodzenej otázke – čo sa stane, keď tlak uvoľníme? Vráti sa štruktúra späť? Veď diamant by pri atmosférickom tlaku vlastne vôbec nemal existovať. Jeho samotná existencia je v istom zmysle omylom prírody (hovorí sa tomu metastabilný stav). Diamant je stabilný stav pri vysokom tlaku, ale po jeho uvoľnení by sa mal vrátiť späť do stabilného stavu pri nízkom tlaku, ktorým je grafit. Môže sa to reálne stať? Treba sa báť, že drahé diamanty sa jedného dňa zmenia na obyčajnú tuhu do ceruzky? A ako je to s vysokotlakovými formami iných materiálov? Prežijú návrat z „nového sveta“ do toho bežného?

Majiteľov diamantov môžeme ukľudniť. Tak, ako je ťažké diamanty vyrobiť, je ťažké ich aj zničiť. Väzby medzi atómami uhlíka sú veľmi silné a pri izbovej teplote je prakticky nemožné ich roztrhnúť.

Prof. Martoňák sa venuje najmä skúmaniu vlastností hmoty pri extrémnych podmienkach pomocou počítačových simulácií.

Presne povedané, diamant je chránený vysokou energetickou bariérou a táto bariéra je pre nás „dobrá“. Vďaka nej sa nerozpadne ani po tisícoch rokov. Neplatí to ale pre všetky nové formy hmoty, ktoré vzniknú pri vysokom tlaku. Niektoré sa po uvoľnení tlaku hneď vrátia do pôvodnej formy alebo dokonca prejdú do inej formy, ako bola pôvodná. Ale diamanty sú aj v tomto špeciálne, a zrejme preto sa hovorí, že sú navždy (len ich nesmieme príliš zohriať, lebo stále je to len uhlík, ktorý môže zhorieť).

REFERENCIE

[1] Wikipedia, By Tobias1984. *This W3C-unspecified vector image was created with Inkscape.*, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=19419201

[2] Wikipedia, By Rob Lavinsky. Self-photographed, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=10164225

[3] Wikipedia, By Mario Sarto. Self-photographed, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=1015397

[4] Murakami, M., Hirose, K., Kawamura, K., Sata, N. & Ohishi, Y. *Post-perovskite phase transition in $MgSiO_3$*. Science 304, 855–858 (2004).

[5] Oganov, A. R. & Ono, S. *Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of $MgSiO_3$ in Earth's D 00 layer.* Nature 430, 445-448 (2004).

[6] Artem R. Oganov, Roman Martoňák, Alessandro Laio, Paolo Raiteri & Michele Parrinello. *Anisotropy of Earth's D" layer and stacking faults in the $MgSiO_3$ post-perovskite phase*. Nature 438, 7642 (2017).

[7] J. Maddox. *News and Views*. Nature 335, 201 (1988).

[8] Pickard, C. J. & Needs, R. J. *High-pressure phases of silane.* Phys. Rev. Lett. 97, 045504 (2006).

[9] Oganov, A. R. & Glass, C. W. *Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications. J. Chem. Phys. 124*, 244704 (2006).

[10] Zhang, W. W. et al. *Unexpected stable stoichiometries of sodium chlorides.* Science 342, 1502–1505 (2013).

[11] Peng, F. et al. *Hydrogen clathrate structures in rare earth hydrides at high pressures: Possible route to room-temperature superconductivity.* Phys. Rev. Lett. 119, 107001 (2017).

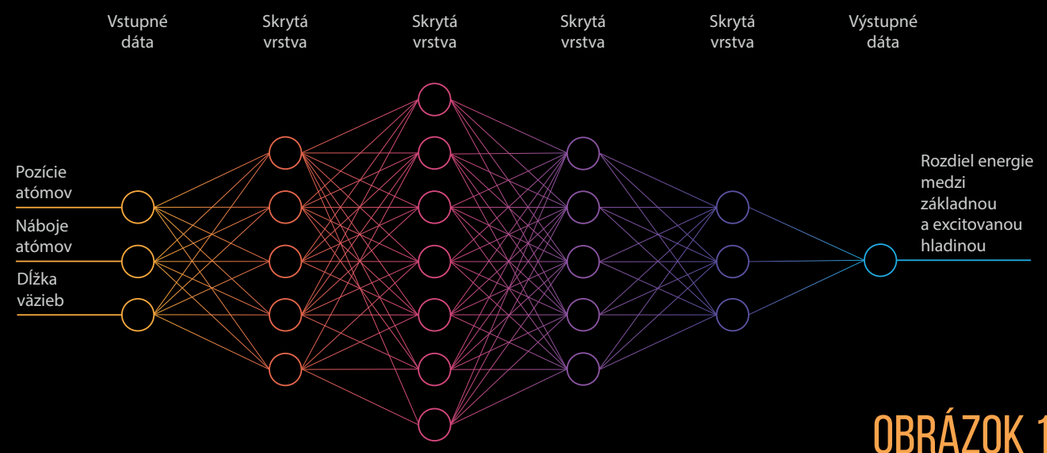
[12] Liu, H., Naumov, I. I., Hoffmann, R., Ashcroft, N. W. & Hemley, R. J. *Potential high-Tc superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure.* Proc. Natl Acad. Sci. USA 114, 6990 (2017).

[13] Drozdov, A. P. et al. *Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures.* Nature 569, 528–531 (2019).

[14] Maddury Somayazulu et al. *Evidence for Superconductivity above 260 K in Lanthanum Superhydride at Megabar Pressures.* Phys. Rev. Lett. 122, 027001 (2019).

Využitie ML/AI pre aplikácie v chémii – potenciálne liečivá na COVID-19

MARIÁN GALL



OBRÁZOK 1

Schéma príkladu neurónovej siete, kde vstupom je štruktúra chemickej látky ako polohy atómov a pod. a výstupom je skúmaná vlastnosť takejto štruktúry ako vnútorná energia a pod.

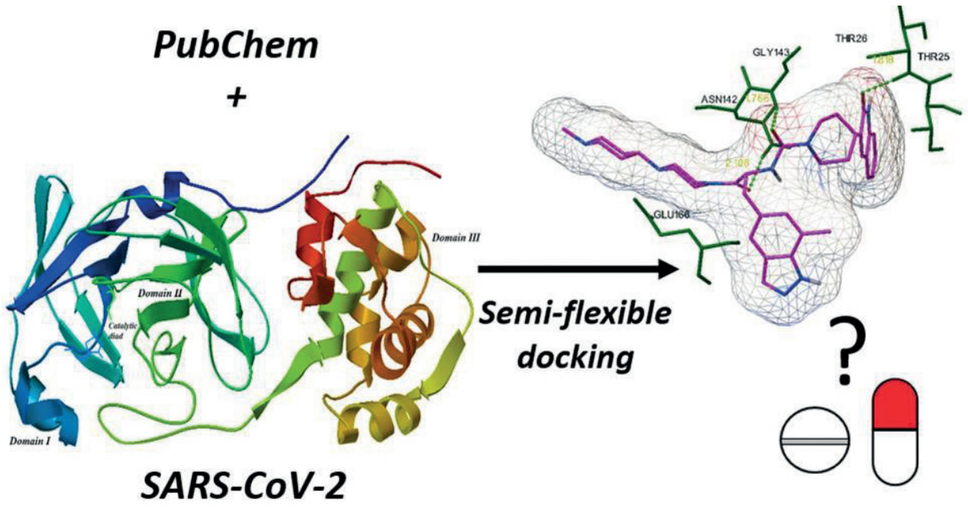
Ing. Marián Gall, PhD. pôsobí na Ústave informatizácie, automatizácie a matematiky FCHPT STU v Bratislave.

Neurónové siete a všeobecne strojové učenie sú príkladom úspešných príbehov v modernej umelej inteligencii. V minulosti viedli k veľkému pokroku v rozpoznávaní obrazov, zvuku, automatickom generovaní textu a ďalších oblastiach. V praxi sa tieto nové možnosti výpočtovej techniky uplatňujú napríklad v zdravotníctve pri diagnostikovaní chorôb zo snímkov počítačovej tomografie, vo výrobe pri kontrole kvality výrobkov alebo dnes často skloňovanom automatickom riadení dopravných prostriedkov. Oblasti ich použitia sú široké a hlavne v posledných rokov prenikajú doslova do každej oblasti ľudskej činnosti.

Základom univerzálnosti neurónových sietí je, že napodobňujú fungovanie mozgu. Modelujú nielen spôsob, akým mozog vykonáva svoje funkcie, ale aj ako sa učí. Neurónové siete sa skladajú sa z neurónov, ktoré sú medzi sebou rôznym spôsobom poprepájané čím vytvárajú sieť. Väčšinou je na vstupe do takejto siete vrstva neurónov, prijímajúca vstupné dáta a naopak na výstupe sa nachádza vrstva neurónov predstavujúca výstupné dáta. Medzi týmito vrstvami sú ďalšie vrstvy neurónov, poprepájané medzi sebou rôznym spôsobom, viď. Obr 1. Druhým dôležitým aspektom správneho fungovania neurónovej siete okrem štruktúry je „učenie" siete. V tomto procese sa neurónová sieť učí akým vstupom majú prislúchať príslušné výstupy. Tento proces je charakteristický tým, že sa mení sila prepojenia medzi neurónmi (váhy v jednotlivých spojeniach). Z matematického pohľadu predstavujú neurónové siete tzv. univerzálny aproximátor – dokážu simulovať akýkoľvek spojitý automat s akoukoľvek presnosťou. Takýmto spôsobom môžu neurónové siete predpovedať výsledky úplne iným spôsobom než akým prebiehajú bežné výpočtové simulácie v počítačoch.

Neurónové siete sa široko uplatnili aj v chemickom a biochemickom výskume. V súčasnosti sú neurónové siete jednou z najbežnejších metód chemoinformatiky na vyhľadávanie kvantitatívnych vzťahov medzi štruktúrou a vlastnosťami látok. Aktívne sa využívajú ako na predpovedanie fyzikálnochemických vlastností, ako aj biologickej aktivity chemických zlúčenín alebo na riadený návrh chemických zlúčenín a materiálov s vopred určenými vlastnosťami, vrátane vývoja nových liečiv (Obr 2).

Aplikáciu neurónových sietí v chémii komplikuje fakt, že popis molekúl pomocou atómov a ich súradníc v priestore, ktorý sa bežne v chémii používa, je nevhodný ako vstup pre neurónové siete. Akýkoľvek posun alebo rotácia štruktúry v priestore by pre neurónovú sieť predstavoval úplne odlišný dátový vstup. Preto sa na popis molekúl a chemických štruktúr používajú tzv. deskriptory. Ide o rôzne matematické postupy a algoritmy slúžiace na prevod súradníc atómov do formy, ktorá bude pre danú štruktúru unikátna (tzv. fingerprint) a zároveň translač-



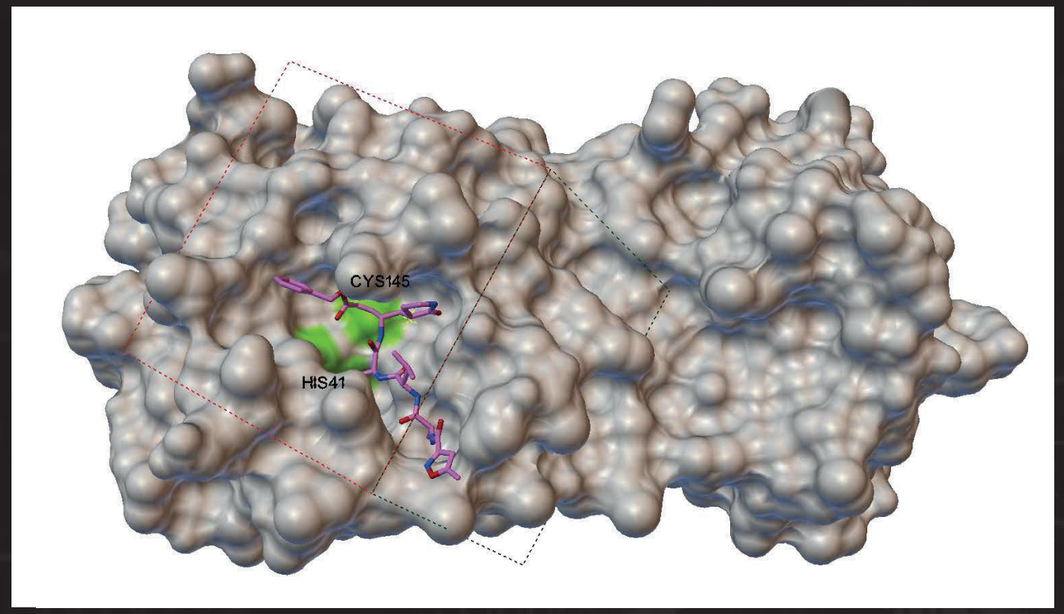
OBRÁZOK 2

Schéma hľadania vhodného kandidáta na liečivo; poznáme štruktúru proteínu, ktorý produkuje vírus s jeho aktívnym miestom a máme k dispozícii databázu štruktúr tisícov látok (PubChem). Pomocou dokovacieho skóre vieme určiť vhodnosť daného kandidáta na liečivo.

ne-rotačne invariantná (nemenná vzhľadom na posun a rotáciu danej štruktúry).

Ak chceme na predpovedanie fyzikálno-chemických vlastností použiť neurónové siete potrebujeme mať pripravenú početnú databázu (desiatky až tisíce) štruktúr látok, na ktorých sa príslušná neurónová sieť naučí predpovedať danú vlastnosť. Takáto databáza sa najčastejšie vytvára použitím niektorej z metód výpočtovej kvantovej-chémie. Tieto metódy poskytujú presné nástroje na skúmanie vlastností molekúl a ich reakcií. Rýchly vývoj HPC (High Performance Computing) pripravil chemikom cestu k využívaniu výpočtovej chémie v ich každodennej práci, napr. na pochopenie, a predpovedanie molekulárnych vlastností a reakcií skúmaných látok, štúdium vlastností materiálov na úrovni atómov, alebo modelovanie reakcií a procesov prebiehajúcich v biologických systémoch. Žiaľ, tieto metódy sú často veľmi náročne na výpočtový čas (v závislosti od požadovanej presnosti), stále však postačujú na vytvorenie databázy pre učenie neurónovej siete. Neurónové siete majú nižšiu výpočtovú náročnosť ako metódy kvantovej chémie pri dosiahnutí porovnateľných výsledkov.

V našom projekte [1] sme sa snažili nahradiť výpočtovo nákladné „dokovanie“ molekúl do kavity cieľového proteínu metódami strojového učenia a neurónových sietí. Bol skúmaný cieľový proteín 3CLpro SARS-CoV-2 (PDB ID: 6WQF), viď. Obr. 3, ktorý hrá kľúčovú úlohu pri replikácii vírusu SARS-CoV-2.



Moji kolegovia Lukáš Bučinský a Marek Štekláč z Ústavu fyzikálnej chémie a chemickej fyziky FCHPT STU pripravili databázu obsahujúcu približne 10 tisíc látok, pre ktoré metódami výpočtovej chémie vypočítali tzv. dokovacie skóre. Jednoducho povedané dokovacie skóre vyjadruje energiu akou sa daná látka viaže na príslušne aktívne miesto na proteíne a tým inhibuje jeho katalytickú schopnosť. Čím je hodnota dokovacieho skóre nižšia (zápornejšia) tým je daná štruktúra viazaná na proteín silnejšie, pričom takéto látky predstavujú vhodných potenciálnych kandidátov na liečivo.

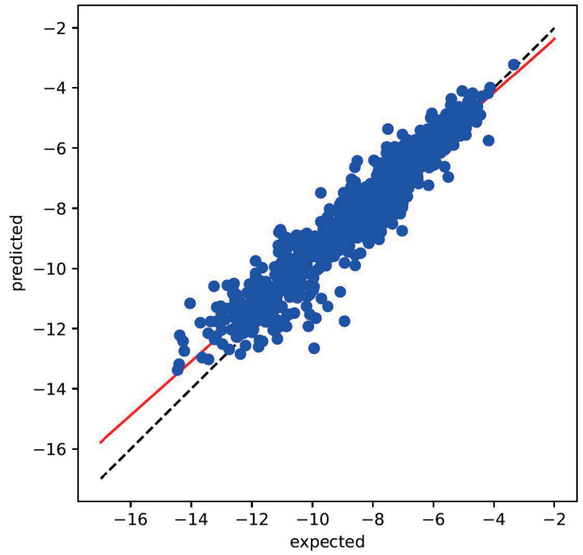
S ďalšími kolegami Jánom Matúškom z Ústavu fyzikálnej chémie a chemickej fyziky FCHPT STU a Michalom Pitoňákom z Katedry fyzikálnej a teoretickej chémie, Fakulty prírodných vied, Univerzity Komenského v Bratislave sme na danú databázu aplikovali tri rôzne prístupy strojového učenia, t.j. neurónovú sieť implementovanú pomocou široko dostupnej knižnice TensorFlow v Pythone, neurónovú sieť SchNetPack a XGBoost (gradient boosted decision trees) metódu za účelom predikcie dokovacieho skóre. Úspešnosť predikčnej schopnosti týchto metód na testovacej vzorke dát môžeme vidieť na grafe 1.

OBRÁZOK 3

Skúmaný cieľový proteín $3CL^{pro}$ SARS-CoV-2 (PDB ID: 6WQF) s aktívnym miestom, na ktorom je naviazaná neznáma látka.

GRAF 1

Závislosť predpovedaných hodnôt dokovacieho skóre neurónovou sieťou na testovacej vzorke zlúčenín od vypočítaných hodnôt metódami výpočtovej chémie. V ideálnom prípade by všetky modré body ležali na čiernej prerušovanej čiare.

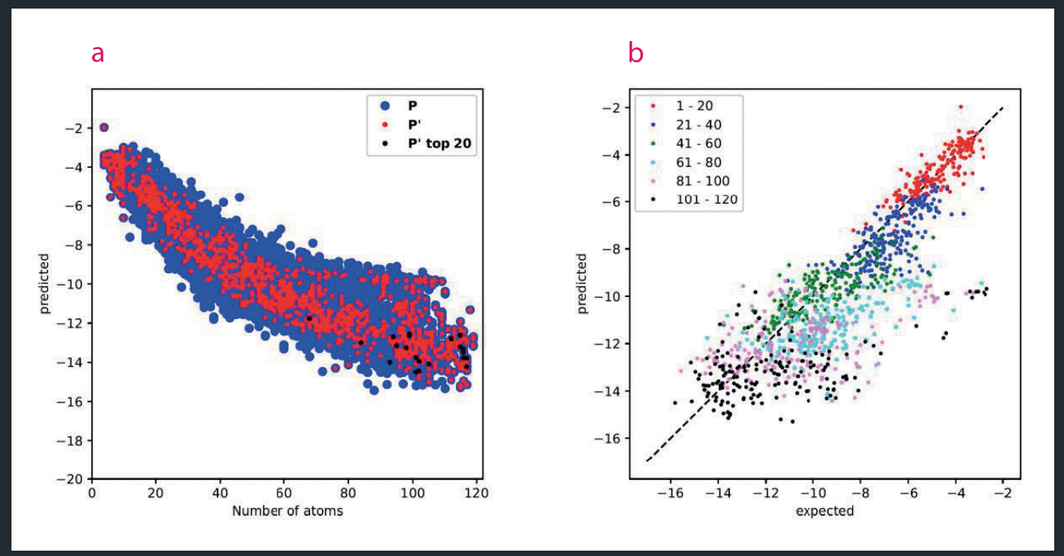


Následne sme takto natrénované modely strojového učenia aplikovali na „in vivo" ZINC databázu obsahujúcu 38 392 unikátnych chemických látok a predikovali sme ich dokovacie skóre, viď graf 2.

Takýmto spôsobom môžeme relatívne rýchlo a dostatočne presne vyselektovať z databázy tisícov látok vhodné štruktúry, ktoré by mohli byť použité ako kandidáti na liečivo na vírusové ochorenie COVID-19.

Na trénovanie modelov strojového učenia bol použitý výpočtový klaster na Ústave experimentálnej fyziky v Košiciach [2].

V rámci európskeho projektu PRACE, do ktorého sme zapojení na Výpočtovom stredisku SAV, každoročne organizujeme aj letnú dvojmesačnú školu pre študentov z celej Európy, Summer of HPC. Na zaujímavých projektoch študenti získavajú prvé skúsenosti s vysokovýkonnými výpočtami na našich výpočtových klastroch. Napriek tomu, že posledné dva roky prebieha tento program online pre pandemické opatrenia spojené s COVID-19, dostávame od študentov pozitívne referencie. V lete 2021 sa v rámci SoHPC do práce na tomto projekte zapojil Scott Le Roux, študent aplikovanej matematiky na Trinity College univerzite v Dubline a vďaka nadobudnutým skúsenostiam a inšpiratívnej spolupráci sa rozhodol pokračovať a bol prijatý na PhD štúdium na prestížnej Oxfordskej univerzite:



Chcel by som sa vám poďakovať za všetku Vašu pomoc s mojim odporúčacím listom a odborným dohľadom minulé leto. Zohralo to veľkú rolu pri rozvíjaní mojich vedomostí a zručností a pochopením toho, ktorým vedným oblastiam sa chcem ďalej venovať, čo ma priviedlo na ďalšie PhD štúdium v tomto odbore, kde som bol úspešne prijatý.

Scott Le Roux

[1] L. Bucinsky, D. Bortňák, M. Gall, J. Matúška, V. Milata, M. Pitoňák, M. Štekláč, D. Végh, D. Zajaček, Machine learning prediction of 3CLpro SARS-CoV-2 docking scores, Comput. Biol. Chem., 98 (2022), Article 107656, 10.1016/j.compbiolchem.2022.107656

[2] Výpočty boli realizované s využitím výpočtovej infraštruktúry projektu SIVVP – Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie, projekt ITMS 26230120002 a 26210120002, ktorý bol podporený v rámci Operačného programu Veda a Výskum financovaného z ERDF.

GRAF 2

Graf (a) zobrazuje predpoveď hodnôt dokovacieho skóre neurónovou sieťou na produkčnej sade 38 392 zlúčenín v závislosti od počtu atómov (modré). Červené body zobrazujú štruktúry, kde sa dokovacie skóre overilo aj metódami výpočtovej chémie. Presnosť predikcie je zobrazená na grafe vpravo (b), kde je farebne rozlíšená aj distribúcia atómov podľa počtu atómov.

VÝSKUMNÁ SKUPINA POČÍTAČOVÉHO MODELOVANIA MATERIÁLOV na ATRI MTF STU v TRNAVE

PREDIKCIA NOVÝCH ANORGANICKÝCH ZLÚČENÍN

Dnešný výskum v oblasti materiálov, či už anorganických, organických alebo biologických, sa zameriava na čoraz komplexnejšie a exotické materiály. Chemici dokážu syntetizovať zlúčeniny s takmer akoukoľvek stechiometriou a štrukturálnou zložitosťou a materiáloví vedci im vedia dať požadovanú formu a veľkosť. Napriek tomu zostáva nepreskúmaná oblasť jednoduchých chemických zlúčenín, ktoré čakajú na svoje objavenie. V mnohých prípadoch sa tento problém týka bežných chemických väzieb a reakcií a s nimi súvisiacich značne nezmapovaných miest na fázových diagramoch už známych a extrémne dôležitých chemických spojení. Príkladom sú početné chýbajúce zlúčeniny prechodných prvkov s kyslíkom a halogénovými prvkami. Medzi nimi sa nachádzajú až zarážajúco jednoduché binárne oxidy a halidy niklu, paládia, medi a striebra, ktoré sú obzvlášť významné a vyžadujú si našu pozornosť. Zatiaľ čo početné fázy a bohatý polymorfizmus sú pozorované pre oxidy a halidy skorých prechodných prvkov, oxidy neskorých prechodných prvkov predstavujú oveľa menej prebádané územie. Toto územie vytvára pôdu pre výskumný program výskumnej skupiny Počítačového modelovania materiálov.

Skupina Počítačového modelovania materiálov vznikla pomerne nedávno v roku 2018 na Ústave výskumu progresívnych technológií Materiálovotechnologickej fakulty STU v Trnave. Jej zakladateľkou je dr. hab. Mariana Derzsi a spolu s Dr. Kamilom Tokárom vedú mladý tím pozostávajúcich zo študentov I. až III. stupňa (bakalárov, inžinierov a doktorandov) a postdokov.

V rámci svojej výskumnej činnosti sa zameriavame na problémy z fyziky tuhých látok a kryštálovej chémie. Primárne sa naša skupina špecializuje na **počítačové modelovanie anorganických kryštalických zlúčenín na atomárnej škále** pomocou kvantovo-mechanických metód založených na teórii hustotového funkcionálu (DFT, z angl. Density Functional Theory) a evolučných algoritmov. Cieľom nášho výskumu je predpovedať nové anorganické zlúčeniny so zaujímavými vlastnosťami a odhaliť ich potenciál ako nových funkčných materiálov. Na ceste k novým funkčným materiálom predstavujú prechodné kovy vysoko atraktívne základné stavebné kamene vďaka otvorenej d šupke (valenčnej sfére), ktorá ponúka bohaté možnosti hry s elektrónovými stupňami voľnosti

OBRÁZOK 1

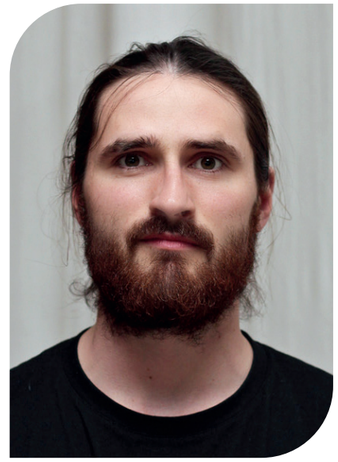
Štruktúra z nanorúrok, materiál AgF_2.

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.

v ich zlúčeninách. Vzájomná súhra medzi elektrónovými a mriežkovými stupňami voľnosti vedie k rozmanitosti ich kryštálových štruktúr a vlastností. Našimi cieľovými materiálmi sú anorganické kryštalické pevné látky obsahujúce prechodné kovy vo forme oxidov a halidov, pričom nás zaujímajú malo prebádane alebo zatiaľ neznáme fázy. Z neskorých prechodných kovov sa zameriavame na nikel, meď, paládium a striebro, pretože existuje len málo jednoduchých oxidových a halidových fáz týchto prvkov a všetky sa intenzívne technologicky využívajú. To je zároveň našou motiváciou pre hľadanie nových oxidov a halidov týchto prechodných prvkov.

Predpoveď novej anorganickej zlúčeniny pomocou počítačov začína od modelovania jej molekulárnej štruktúry a v prípade kryštalickej látky jej kryštálovej štruktúry čiže usporiadania atómov v kryštáli. Znalosť kryštálovej štruktúry je kľúčová pre výpočet širokého spektra fyzikálno-chemických vlastností vrátane termodynamickej stability, respektíve podmienok (teploty a tlaku), v ktorých skúmaná zlúčenina môže existovať. Našou primárnou úlohou je preto predikcia kryštálovej štruktúry hľadaného materiálu.

Na predikciu kryštálových štruktúr nových fáz v systémoch s požadovanou chemickou stechiometriou používame pokročilé techniky evolučných algoritmov (EA) v spojení s kvantovo-mechanickými metódami založenými na teórii hustotového funkcionálu (DFT). Prvoprincípové EA modelovanie nových kryštálových štruktúr vychádza z procesov selekcie, mutácie, kríženia jedincov a 'prirodzeného výberu' známych v biológii a genetike, čím sa výrazne a efektívne redukuje výber modelových štruktúr z nepredstaviteľného počtu možných komplexných spojení, ktoré sa dajú vygenerovať ´hrubou silou´ podľa pravidiel náhodného výberu. Ide tak o významnú redukciu potrebného množstva evaluovaných štruktúr z rádovo desaťtisíce na rádovo tísic. DFT metódy využívame pri optimalizácii modelov kryštálových štruktúr generovaných evolučnými algoritmami, ďalej na výpočet ich dôkladných energii, ktoré sú základným kritériom pri ich selekcii, a následne na výpočet fyzikálno-chemických vlastností už predpovedaných kryštálových štruktúr. Naše modely kryštálových štruktúr obsahujú desiatky až stovky atómov. V praxi predstavujú kvantovo-mechanické výpočty takýchto mnohoatómových modelov nesmierne komplikovanú úlohu popisu mnohoelektrónových systémov (tisícky elektrónov), v ktorých elektróny interagujú jednak medzi sebou, ale aj s iónmi látky. DFT ponúka významné zjednodušenie tohto problému. Jej schéma vychádza z redukcie mohoelektrónového problému na jednoelektrónový, kde sa samotný elektrón pohybuje v akomsi náhradnom efektívnom potenciáli tvorenom ostatnými elektrónmi a iónmi. Príslušné rovnice kvantovej mechaniky sa tým značne zjednodušia a je ich možné ľahšie riešiť numerickými algoritmami, čím sa do istej miery trvanie výpočtu obmedzí na prijateľné časy. Základné princípy tohto prístupu boli navrhnuté Kohnom a Shamom už v roku 1965. Samotnému Walterovi Kohnovi bola za prínos pri rozvoji tejto metódy udelená Nobelova cena až v roku 1998. DFT metódy a jej vylepšenia (DFT+U, hybridné DFT, meta-GGA) tak zohrávajú kľúčovú rolu a sú už dlhodobo štandardom v kvantovo-mechanickom modelovaní kryštálových štruktúr. Prepojenie DFT metód s evolučnými algoritmami dnes predstavuje najefektívnejší spôsob predpovedi kryštálových štruktúr, ktorý je v praxi len necelé dve dekády. Implementácia evolučných algoritmov si vyžaduje prístup k rozsiahlym výpočtovým zdrojom, ktoré sú nám na Slovensku k dispozícii vďaka Národnému superpočítačovému centru. Kľúčovou osobou, ktorá nám pomáha s implementáciou a aplikáciou EA na predikciu kryštálových štruktúr je **Dr. Oto Kohulák**, ktorý pôsobil v našej skupine v 2019 roku. Oto vyvinul pre potreby nášho výskumu viacero výpočtových nástrojov, ktoré slúžia na automatizáciu výpočtových postupov a analýz EA dát. Momentálne pôsobí na International School for Advanced Studies (SISSA) v Taliansku, pričom naďalej spolupracuje s našou skupinou.



Dr. Oto Kohulák rieši v našej skupine hardvérové a softvérové problémy ohľadne implementácie a aplikácie evolučných algoritmov (EA) na predikciu kryštálových štruktúr. Pre potreby nášho výskumu tiež vyvinul výpočtové nástroje na automatizáciu DFT+EA výpočtov a ich analýz.

Striebro
Ag
47

Striebro

Predstavuje nami doposiaľ najviac skúmaný prechodný prvok. Intenzívne sa venujeme modelovaniu jeho zlúčenín s fluórom a chlórom. Striebro v spojení s týmito halogénmi má potenciál tvoriť materiály s výnimočnými vlastnosťami, ktoré ich predurčujú na multifunkčné materiály budúcnosti, o čom nás presvedčujú nedávne objavy: zlúčenina s anomálne silnými magnetickými interakciami ($Ag^{2+}SO_4$) [1], potenciálne prvý strieborný materiál typu multiferroic či nová unikátna forma nanorúrky (rôzne $Ag^{2+}F_2$ fázy) [2,3].

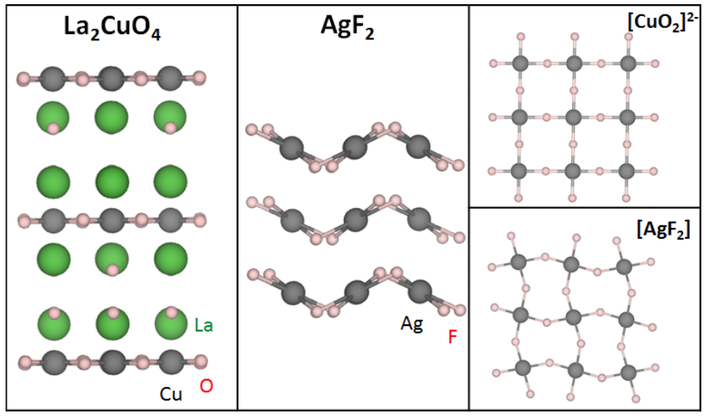
To, čo definuje výnimočnosť týchto zlúčenín je predovšetkým prítomnosť špecifického katiónu striebra Ag^{2+}. Jeho výskyt je však veľmi ojedinelý. Za jeho raritu sú zodpovedné extrámne silné oxidačné vlastnosti tohto katiónu, o čom svedčí schopnosť Ag^{2+} zoxidovať inertný xenón do Xe^{2+}. Nájsť rovnocenného partnera pre tak agresívneho pojedača elektrónov je veľmi náročná a navyše pre chemikov nebezpečná úloha. Počítačové modelovanie predstavuje v tomto ohľade veľmi žiaducu alternatívu k riskantným chemickým experimentom. Najjednoduchšími ligandami, ktoré sa javia ako vhodní partneri pre Ag^{2+} sú vďaka svojej vysokej elektronegativite fluór a chlór, preto sa náš výskum striebra sústreďuje na jeho fluoridy a chloridy.

Striebro s fluórom

Kandidát na nový vysokoteplotný supravodič

Materiály na báze striebra a fluóru majú veľký potenciál stať sa zdrojom novej rodiny veľmi intenzívne vyhľadávaných vysokoteplotných supravodičov. Supravodič je materiál, ktorý vedie elektrický prúd bez odporu (tepelnej straty), ak jeho teplota klesne pod kritickú teplotu. V drvivej väščine známych supravodičov je táto kritická teplota extrémne nízka, blízka absolútnej nule (-273 °C) a preto sú nevhodné na praktické využitie. Výnimku tvoria keramické materiály na báze medi a kyslíka (oxokupráty), ktoré dosahujú krytické teploty na úrovni teploty kvapalného dusíka (-196 °C), ktorý je už bežne priemyselne dostupný. Vo svete supravodičov ide však o neobyčajne vysoké teploty, preto materiály, ktoré vykazujú takéto kritické teploty, sa nazývajú **vysokoteplotné supravodiče**.

OBRÁZOK 2



Fragment kryštálovej štruktúry vrstevnatého oxokuprátu La_2CuO_4 porovnaný s kryštálovou štruktúrou AgF_2. Oba obsahujú izoelektronické šachovnicové vrstvy $[CuO_2]^{2-}$ resp. $[AgF_2]$. Kým v oxokupráte sú tieto vrstvy ideálne rovné, v AgF_2 sú pokrčené.

Prevzaté so súhlasom autorov z [J. Gawraczyński, D. Kurzydłowski, W. Gadomski, Z. Mazej, T. Jaroń, A. Ozarowski, S. Hill, P. J. Leszczyński, K. Tokár, M. Derzsi, P. Barone, K. Wohlfeld, J. Lorenzana and W. Grochala, The silver route to cuprate analogs, PNAS, 116 (5) 1495-1500 (2019)].

Nami primárne skúmaný fluorid striebornatý AgF_2 vykazuje veľa podobenstiev s oxokuprátmi, čo ho predurčuje na atraktívneho kandidátna prekurzor novej rodiny supravodivých materiálov [4]. Z hľadiska dosiahnutia supravodivosti, sa za najvýznamnejšie vlastnosti oxokuprátov považujú (takmer) ideálne rovné vrstvy tvorené atómami medi a kyslíka, ktoré spolu tvoria šachovnicový motív, a silné antiferomagnetické interakcie medzi atómami medi v nich. Konkrétne ide o tzv. antiferomagnetickú supervýmenu, ktorá je medzi atómami medi sprostredkovaná prostredným atómom kyslíka. Vo fluoride striebornatom sa nachádzajú analogické ‚šachovnicové' vrstvy s identickými magnetickými interakciami (Ag^{2+} a F^- sú izoelektronické s Cu^{2+} a O^{2-}) avšak nie sú rovné ale pokrčené (Obr. 2). To, či a ako je možné tieto vrstvy vyrovnať, je jedným z problémov, ktorému sa v našich počítačových simuláciách už dlhodobo venujeme. Podľa doterajších DFT výpočtov, vyrovnanie týchto vrstiev vedie v výraznému zosilneniu magnetických interakcii, čo následne implikuje vysokú kritickú teplotu, pri ktorej by AgF_2 mohlo byť potenciálne supravodivé. Domnievame sa, že by táto kritická teplota mohla byť porovnateľná alebo aj vyššia ako v prípade oxokuprátov. V oxokuprátoch sa supravodivý stav dosahuje buď vnášaním nečistôt (malého množstva iného chemického prvku – dopovanie) a/alebo zmenou koncentrácie kyslíka (tvorba kyslíkových vakancií alebo vnášanie adatómov). Cieľom týchto chemických modifikácii je vnesenie malého nadbytku elektrónov než môžu dané chemické väzby prijať (tomuto procesu hovoríme dopovanie elektrónmi) alebo naopak mierneho nedostatku valenčných elektrónov vo väzbách (dopovanie dierami). Okrem chemickej cesty, môže dôjsť k navodeniu takejto situácie aj vhodnou modifikáciou vonkajších podmienok tlaku a teploty (samodopovanie). Možné spôsoby dopovania AgF_2 sú druhým hlavným problémom, ktorý riešime na ceste k novým supravodivým materiálom na báze striebra a fluóru. V našich simuláciách sme sa zamerali na viacero scenárov: (*i*) vnášanie fluórových vakancií a adatómov (tvorba $AgF_{2-\delta}$ resp. $AgF_{2+\delta}$), (*ii*) dopovanie elektrónmi a dierami bez chemickej modifikácie, (*iii*) substitúciu atómov striebra prvkom iného prechodného prvku (štúdium ternárnych fáz $AgMF_4$), (*iv*) pôsobenie na AgF_2 vysokými tlakmi, (*v*) charge-transfer (prenos náboja) mechanizmus $Ag^{2+} \rightarrow Ag^{1+/3+}$.

OBRÁZOK 3

Vzorka AgF_2. Prechovávaná je v ochrannom obale, aby nereagovala so vzduchom. Kredit: Laboratory of Technology of Novel Funcional Materials, CeNT, Varšavská univerzita.

Vnášanie fluórových vakancií a adatómov sme simulovali vytvorením modelu superbunky AgF2, ktorá obsahovala 192 atómov (32 jednotiek AgF2). V tomto modeli sme postupne ‚vytrhávali' a ‚dodávali' atómy fluóru. Vytrhávaním atómov fluóru sme simulovali tvorbu $AgF_{2-\delta}$, čo je ekvivalentné dopovaniu AgF2 elektrónmi. Dodávaním extra atómov fluóru sme simulovali tvorbu $AgF_{2+\delta}$ a teda dopovanie dierami. Zohľadnili sme koncentrácie dopovania δ = (1/8, 1/16 a 1/32), pričom bežná hodnota δ, pri ktorej sa dosahuje supravodlivosť v oxokuprátoch je blízka 1/8. Naše simulácie napovedajú, že dopovanie elektrónmi ani dierami nevedie k požadovanej metalizácii AgF2. Nové elektrónové stavy, ktoré vznikajú v dôsledku dopovania sú vysoko lokalizované. Navyše vnášané defekty (adatómy a vakancie) majú tendenciu sa zhlukovať, čo vedie k separácii fáz (roz-

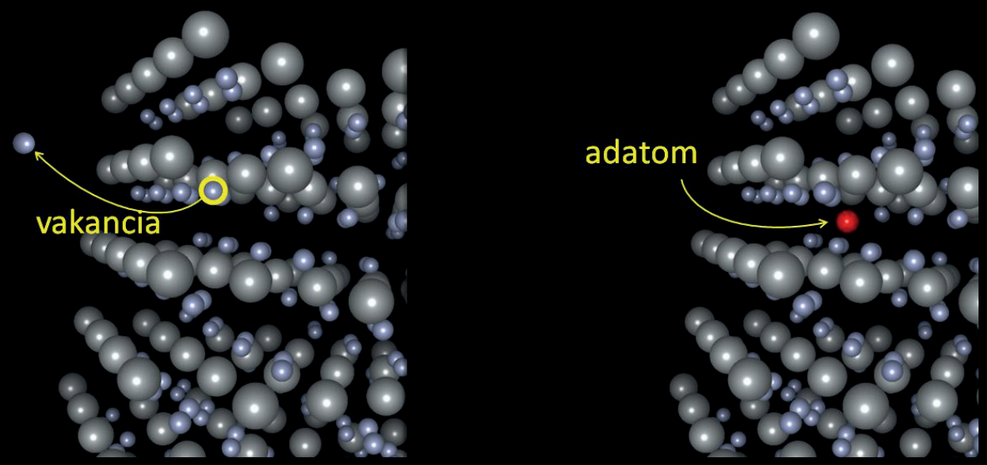
OBRÁZOK 4

Fragment kryštálu AgF_2 so simulovanou vakanciou (vľavo; vytrhnutie atómu fluóru) a simulovaným adatómom (napravo; dodanie atómu fluóru navyše). Vakanciou vytvoríme $AgF_{2-\delta}$ a dodaním adatomu vznikne $AgF_{2+\delta}$.

Legenda: veľké guličky – atómy striebra, malé guličky – atómy fluóru.

padu). Tieto výsledky naznačujú, že dopovanie AgF2 chemickou cestou bude extrémne náročné (ak nie nemožné) [5].

Či už dopovanie AgF2 chemickou cestou bude alebo nebude možné, dopovanie elektrónmi a dierami vieme simulovať aj bez toho, aby sme poznali chemickú identitu dopovaného prvku. Namiesto pridávania alebo odoberania chemického prvku, môžeme do nášho modelu jednoducho vniesť alebo vybrať z neho samotné elektróny. Inými slovami si zadefinujeme celkový počet elektrónov v systéme. Takýmto spôsobom sa môžeme zamerať na čisto fyzikálnu podstatu problému, bez zaangažovania chémie (a s ňou spojených dodatočných komplikácii). Takúto stratégiu sme zohľadnili v modeli s 24 atómami (superbunka s 8 jednotkami AgF2). Takýto model obsahuje celkovo 200 elektrónov. Dodaním respektíve odobraním jedného elektrónu sme simulovali dopovanie elektrónmi respektíve dierami s koncentráciou 1/8 (hodnota relevantná v prípade oxokuprátov).



V tejto štúdii sme sa dozvedeli, že dopovanie elektrónmi aj dierami vedie k ďalšiemu nežiaducemu efektu a menovite k tvorbe polarónov. Polarón je kvázičastica, ktorá vzniká viazaným stavom elektrónu (resp. diery) a oblakom fonónov (vibrácií kryštálovej mriežky). Prejavuje sa ako deformácia kryštálovej mriežky, ktorá sa premiestňuje spolu s elektrónom (dierou). Tvorba polarónov v AgF2 je nežiadúca, pretože je spojená s lokalizáciou náboja a dodatočnou deformáciou vrstiev, čo je presne opačný efekt ako chceme dosiahnuť. Polarón sa nevytvorí len v špeciálnom hypotetickom prípade, kedy vrstvy AgF2 sú ideálne rovné (v reálnom materiáli sú pokrčené). Dopovanie rovných AgF2 vrstiev tak môže viesť k požadovanej metalizácii AgF2, pričom ako ideálne riešenie sa podľa našich výpočtov javí nanesenie monovrstvy AgF2 na vhodný substrát. Takéto riešenie umožňuje obísť problém tvorby polarónu aj v prípade dopovania AgF2 dierami. Tieto výsledky podčiarkujú už vyššie spomínanú potrebu dosiahnutia rovných vrstiev v AgF2 tak ako je tomu v oxokuprátoch [6].

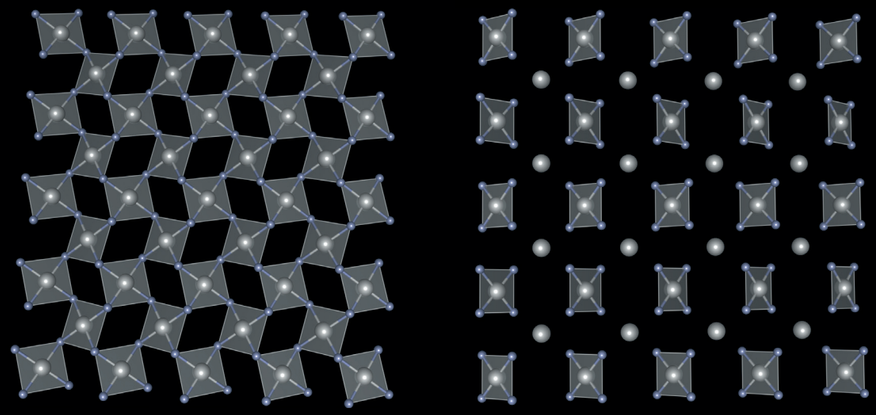
Jedným zdanlivo intuitívnym prístupom ako vyrovnať pokrčené vrstvy je pôsobiť na ne vysokým tlakom. V minulosti sme vynaložili veľa úsilia štúdiu AgF2 pod vysokým tlakom. Doviedlo nás k prekvapujúcemu výsledku, ktorý bol v rozpore z tým, čo sme očakávali. Namiesto vyrovnania pokrčených vrstiev, došlo k takému preskupeniu atómov, že sa vytvorila rúrkovitá štruktúra. Na základe nami predpovedaného teoretického modelu, bola úspešne vyriešená kryštálová štruktúra vysokotlakovej formy AgF2 z kryštalografických dát (röntgenového difrakčného záznamu). Takto nečakane sme objavili nový druh nanorúrky na báze striebra a fluóru (Obr. 1) [2,3]. Pôvodne sme objavili novú kryštálovú štruktúru, ktorá pozostávala z AgF2 nanorúriek poukladaných vedľa seba tvoriac hexagonálny motív. Vzhľadom na výnimočnosť objavu sme sa následne zamerali na teoretické štúdium vlastností jednej ‚voľnostojacej' AgF2 nanorúrky. Zistili sme, že hoci sme tento materiál získali pod vysokým tlakom, obe formy (skryštalizovaná aj voľnostojaca AgF2 nanorúrka) sú stabilné aj v nízkych tlakoch, t.j. v bežných ‚izbových' podmienkach [7,8].

Nečakane sme objavili nový druh nanorúrky na báze striebra a fluóru. Pôvodne sme objavili novú kryštálovú štruktúru, ktorá pozostávala z AgF_2 nanorúriek poukladaných vedľa seba tvoriac hexagonálny motív.

Vracajúc sa k pôvodnému plánu vyrovnať a zmetalizovať pokrčené AgF2 vrstvy, zamerali sme sa na efekt substitúcie. Zadali sme si otázku, či by bolo možné dosiahnuť vyrovnanie AgF2 vrstiev tým, že polovicu katiónov striebra Ag^{II} v nich zameníme za iný katión M^{II} s možnosťou čiastočného presunu elektrónov z M na Ag. Substitúciou atómov striebra prvkom iného prechodného kovu sme sa posunuli smerom k štúdiu ternárnych zlúčenín so stoichiometriou AgMF4. Na dosiahnutie tohto cieľa je potrebné vybrať také katióny M^{II}, ktorých elektrónová konfigurácia umožňuje prijať štvorcovú koordináciu ligandami, tak aby bol zachovaný šachovnicový charakter vrstvy, aby sa nezmenil charakter magnetických interakcií vo vrstvách a aby dané katióny dokázali vzdorovať oxidácii katiónom striebra Ag^{2+}. Takýto potenciál majú katióny Co^{2+}, Ni^{2+} a Cu^{2+}. Naše výpočty na-

značujú, že na dosiahnutie stabilizácie nových ternálnych zlúčenín $AgMF_4$ kde M = (Co, Ni, Cu) je potrebne vyvinúť vysoké tlaky. V nízkych tlakoch (normálnych podmienkach) budú nanajvýš metastabilné vzhľadom na ich binárne prekurzory AgF a MF_2 [9].

Supravodivý stav v oxokuprátoch často koexistuje alebo sa prelína s iným stavom, ktorý je charakteristický preskupením elektrónového náboja. V dôsledku tohto preskupenia sa môžu stabilizovať rôzne tzv. charge-ordering (CO) fázy. Nie je úplne vyjasnené či tieto fázy rivalizujú so supravodivým stavom, alebo ho podporujú. Každopádne vedecká komunita je čoraz viac presvedčená, že existuje súvis medzi CO a supravodlivosťou v oxokuprátoch. Z tohto dôvodu nás zaujíma potenciál AgF_2 vytvárať CO fázy a ako v ňom funguje charge-ordering mechanizmus. Jedna CO AgF_2 fáza ($Ag^{1+}Ag^{3+}F_4$) bola indikovaná už dávnejšie. Z experimentálnych dát nebolo možné túto fázu detailnejšie charakterizovať. Preto sme sa na ňu zamerali v našich počítačových simuláciach. Opísali sme jej navrhovanú kryštálovú štruktúru a porovnali jej vlastnosti s vlastnosťami dominantnej vrstevnatej AgF_2 fázy [10]. Následne sme v našej najnovšej štúdii vysvetlili prečo bola CO fáza v AgF_2 doposiaľ taká aluzívna a objasnili CO mechanizmus v AgF_2 [11,12].

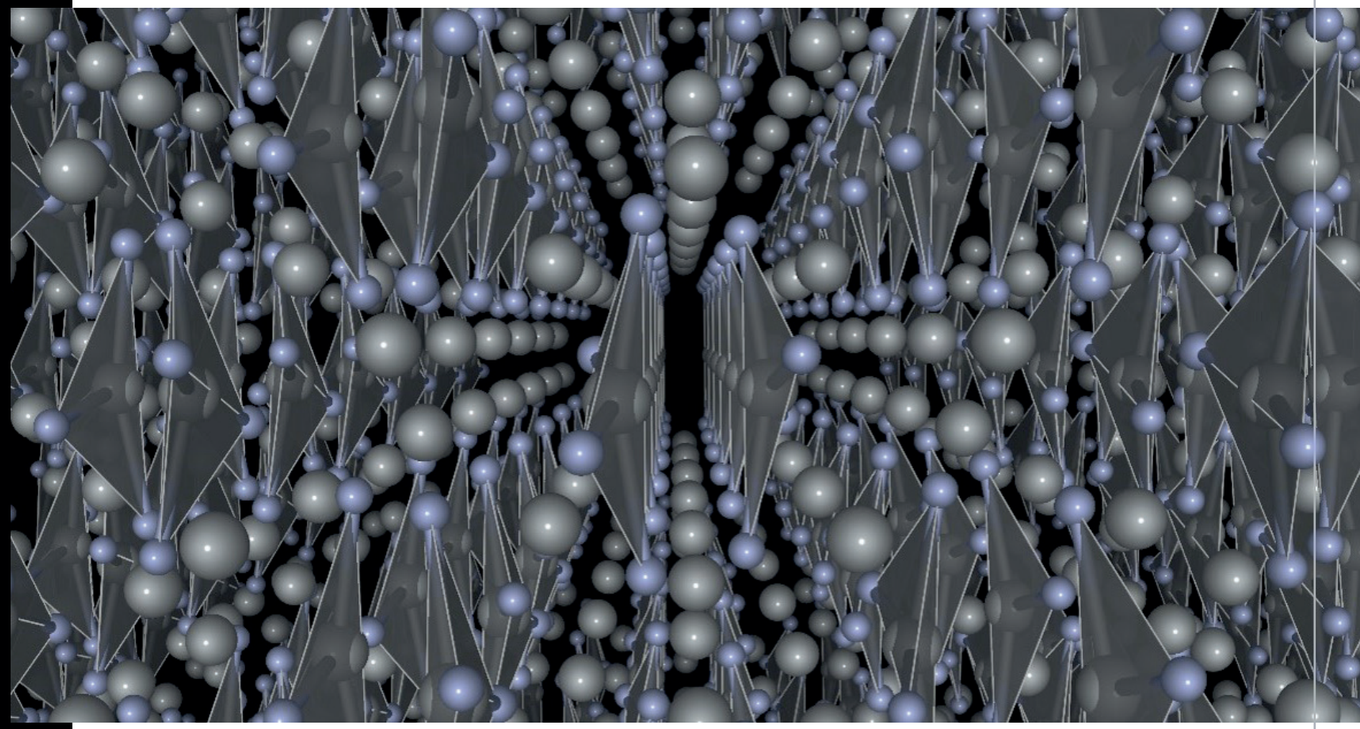


Okrem AgF_2 sme sa zamerali aj na hľadanie nových binárnych fáz striebra s fluórom v širokom intervale hydrostatických tlakov [13]. Medzi zaujímavými predpovedanými zlúčeninami sa vyníma fluorid streborničitý AgF_4, ktorý ako jediný spomedzi všetkých známych aj predpovedaných Ag-F fáz vykazuje elektrickú vodivosť (half-metal) a striebro sa v ňom nachádza

OBRÁZOK 5

Dva polymorfy kryštalického fluoridu striebornatého AgF_2. Naľavo vidíme polymorf s neprerušenou sieťou chemických Ag-F väzieb (vrstevnatý polymorf α). Napravo vidíme polymorf s prerušenou sieťou chemických Ag-F väzieb (polymorf β, CO AgF_2 fáza $Ag^{1+}Ag^{3+}F_4$).

Legenda: veľké guličky – atómy striebra, malé guličky – atómy fluóru.



formálne vo štvrtom (veľmi exotickom) mocenskom stave Ag^{4+}. Nevýhodou je, že sa stabilizuje až vo veľmi vysokých tlakoch ponad 50 GPa. S pomedzi všetkých Ag-F fáz, tých známych aj nami predpovedaných, AgF_2 ostáva naďalej najvýznamnejším kandidátom na nový vysokoteplotný supravodič.

Striebro s chlórom

Ako sme už vyššie spomenuli, existuje len jedna fáza striebra s fluórom, ktorá ma požadované vlastnosti z hľadiska dosiahnutia supravodivosti. Preto je viac než žiaduce vykročiť poza známu ríšu fluoridov. Chlór je druhý najelektronegatívnejší chemický prvok po fluóre a pri vhodných podmienkach by mal zniesť prítomnosť agresívnych katiónov striebra ako Ag^{2+} či Ag^{3+}. Preto sme sa rozhodli intenzívne zamerať na chlór ako alternatívu ku fluóru.

Jedinou známou fázou striebra s chlórom je chlorid strieborný AgCl. Žiaden chlorid striebra Ag^{2+} či Ag^{3+} nie je doposiaľ známy. Nič o týchto materiáloch nevieme! To čo ale vieme je, že meď a zlato, ktoré spolu so striebrom tvoria jednu chemickú

OBRÁZOK 6

Fragment počítačového modelu kryštálu Ag_3F_4, ktorého tvorbu sme predpovedali v nízkych aj vysokých tlakoch do 20 000 miliónov pascalov (~200 000 atmosfér).

Legenda: veľké guličky – atómy striebra, malé guličky – atómy fluóru.

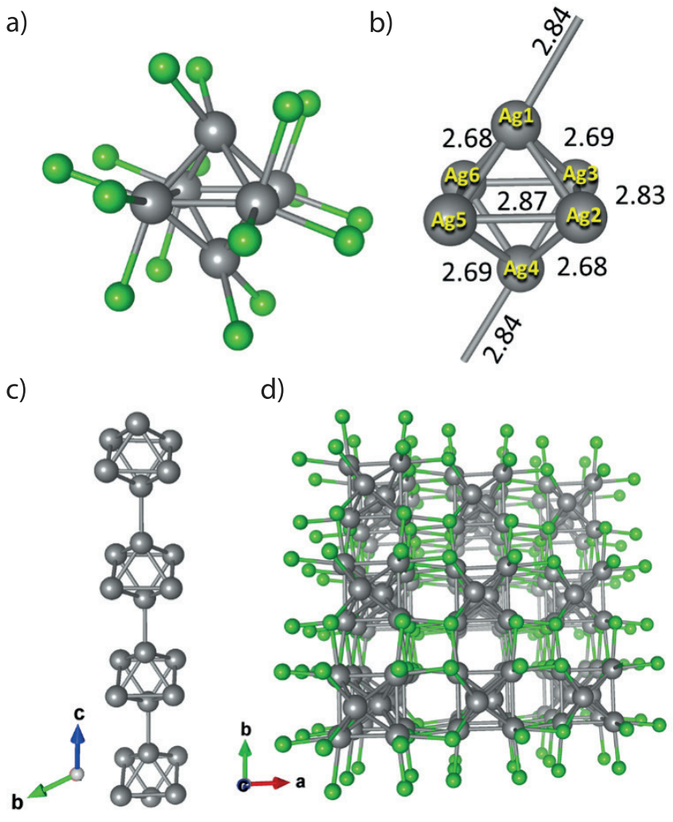
Ing. Matej Uhliar pôsobil v skupine Počítačového modelovania materiálov v rokoch 2018-21. Venoval sa počítačovému DFT+EA modelovaniu chloridov striebra v rámci svojej bakalárskej a magisterskej práce a mimoškolských aktivít.

skupinu v periodicej tabuľke prvkov, také zlúčeniny tvoria. Chlorid strieborný, AgCl, je dobre známa kryštalická pevná látka, ktorá je už dve storočia veľmi využívaná pre svoje fotoaktívne vlastnosti a ako taká je dodnes intenzívne skúmaná. Môže byť pripravený v rôznych štruktúrnych formách a morfológiách a v rôznych rozmeroch. Je zaujímavé, že žiadna iná kryštalická fáza striebra s chlórom nie je známa. To je prekvapujúce aj vzhľadom na bohatosť stechiometrií v iných chloridoch prechodných kovov, z ktorých najčastejšie sú okrem monochloridov aj di- až pentachloridy (MCl_n, n=1,2,3,4,5). Preto sme sa rozhodli v prvom rade nájsť odpoveď na otázku prečo doposiaľ nepoznáme iné fázy striebra s chlórom. To si vyžaduje rozsiahle simulácie modelov Ag_xCl_y s rôznym zastúpením atómov striebra a chlóru od čistého kovového striebra (0 % Cl) až po molekulárny chlór (100% Cl).

Ako prvého kandidáta sme vybrali $AgCl_2$, keďže predstavuje možný chloridový variant AgF_2, pričom sme použili našu štandardnú kombináciu metód EA+DFT. Dospeli sme k záveru, že syntéza $AgCl_2$ si bude vyžadovať nerovnovážne termodynamické prístupy a požadovaná vrstevnatá štruktúra, analogická k AgF_2, nepredstavuje energeticky najvýhodnejšiu štruktúru [14]. Súčasne nám táto vstupná štúdia poskytla veľmi cennú informáciu, ktorá významne zjednodušila naše ďalšie simulácie. Naše výsledky ukázali, že všetky stabilné štruktúry $AgCl_2$ možno odvodiť z jednoduchej kubickej mriežky (fcc), v ktorej kryštalizuje striebro s protiiónmi v intersticiálnych miestach. Potvrdili sme tak bežný štrukturálny stavebný princíp pozorovaný naprieč celým spektrom známych binárnych kovových halidov. V ďalších simuláciách sme použili tento štruktúrny princíp ako východiskový bod pre modelovanie širokého spektra Ag-Cl fáz. Naše modely vychádzajú zo základnej kubickej bunky striebra, do ktorej sme postupne dodávali Cl atómy do intersticiálnych priestorov. Takto sme obišli oveľa náročnejšie EA výpočty pre časť fázového diagramu pozostávajúceho zo subchloridov (s prevažujúcim zastúpením atómov chlóru). Naša prebiehajúca štúdia začína odhaľovať bohatú kryštálovú chémiu v binárnom Ag-Cl systéme vrátane jednoduchých subchloridov, klastrových zlúčenín, iónových kryštálov a zlúčenín s polychlórovymi aniónmi. Súčasne odhaľuje do akej miery sa chloridy striebra s rôznym pomerom Ag/Cl riadia princípom tesného usporiadania atómov v kryštálovej mriežke. Tieto cenné informácie nám v ďalšom poslúžia na sformovanie princípov, ktorými sa riadi kryštálová chémia chloridov striebra. Je povzbudzujúce, že prvé experimenty našich partnerov z Poľska, Číny a USA, na interpretácii ktorých sme sa podielali, začínaju potvrdzovať naše predpovede [15].

Jedným z najpozoruhodnejších výsledkov, ktoré sme v štúdiu binárneho Ag-Cl systému dosiahli, je predpoveď subchloridu striebra Ag_6Cl_4 [16]. Táto zatiaľ neznáma zlúčenina má hneď niekoľko výnimočných vlastností. Obsahuje veľmi vzácne Ag_6 klastre s lokalizovanými elektrónmi. Tieto Ag_6 klastre sú usporiadané do nekonečných retiazok, v ktorých medzi sebou interagujú argentofilnými interakciami. Argentofilné interakcie sú príťažlivé interakcie medzi katiónmi striebra Ag^+ s formálne zatvorenou d šupkou podobne ako v prípade atómov vzácnych plynov.

V prípade striebra ide dodatočne o interakcie medzi katiónmi a preto by sme prirodzene očakávali, že sa budú odpudzovať a nie priťahovať. Dodatočne tento subchlorid je diamagnetický polovodič s nečakane širokým zakázaným pásmom.



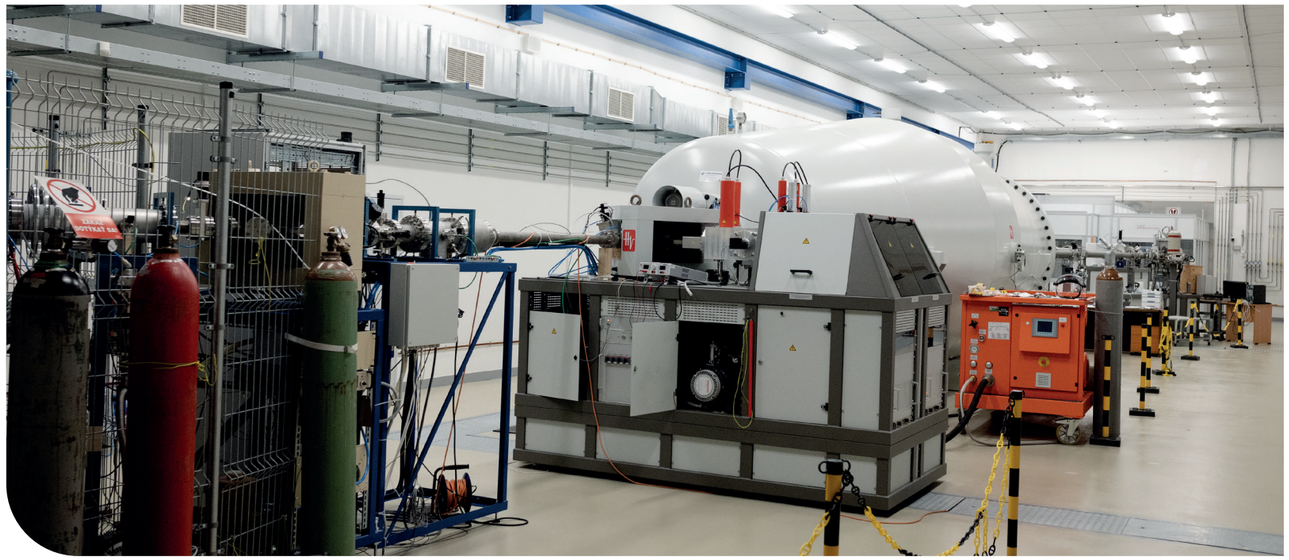
OBRÁZOK 7

Predpovedaný prvý subchlorid striebra Ag_6Cl_4. Skladá sa z Ag_6 klastrov obalených chlórovými atómami (a,b). Ag_6 klastre tvoria nekonečné retiazky (c). Fragment kryštálovej štruktúry je znázornený v panely (d).

Prevzaté so súhlasom autorov z [M. Derzsi, M. Uhliar and K. Tokár. On possible existence of first $[Ag_6]^{4+}$ cation in chloride environment. Chem. Commun. 57,10186-10189 (2021)].

MODELOVANIE A EXPERIMENT

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



To je nečakané zistenie, keďže zlúčeniny v ktorých prevažuje zastúpenie kovového prvku sú spravidla elektrickými vodičmi (vlastnosťami sa približujú kovom). V anorganickej chémii sú takéto zlúčeniny veľkou zriedkavosťou. Sú limitované len na hŕstku suboxidov s obsahom striebra (napr. Ag_5GeO_4). Žiaden iný neorganický materiál nemá túto kombináciu vlastností. Náš objav ukázal, že striebro môže tieto vlastnosti dosiahnuť aj v spojení s halogénovými prvkami. Tomuto objavu vďačíme Ing. Matejovi Uhliarovi, dnes doktorandovi na FChPT STU, ktorý sa venoval počítačovému modelovaniu nových Ag-Cl fáz v rámci svojej bakalárskej [17] a magisterskej práce [18] a mimoškolských aktivít [19, 20].

POČÍTAČOVÉ MODELOVANIE A EXPERIMENT

„Škoda že je iba vymyslená...(?)“ 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 technológii MTF STU. Za týmto účelom úzko spolupracujeme s Oddelením iónových technológií a s Ústavom materiálov, kde naši kolegovia robia všetko preto, aby nami predpovedané materiály zhmotnili. Pod vedením **Ing. Pavla Nogu, PhD.** sa nami predpovedané zlúčeniny snažia realizovať použitím fyzikálnych a fyzikálno-chemických metód, ako je syntéza pomocou iónového zväzku a reaktívne magnetrónové 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 **doc. Ing. Martin Kusý, PhD.** Spolu s docentom 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 DFT a EA sme používali SIVVP infraštruktúru a to najmä superpočítač Aurel v SAV v Bratislave a klaster lokalizovaný v Košiciach, ako aj HPC infraštruktúry v medzinárodných partnerských inštitúciách. Úzko spolupracujeme najmä s našimi medzinárodnými partnermi z Varšavskej univerzity, Poľskej akadémii vied, Univerzity of Buffallo, Università di Roma “La Sapienza, a State University of New York at Buffalo. V rámci týchto spoluprác sme hosťovali viacero zahraničných študentov, v tom magistrantov, doktorandov a postdokov. Výsledky, ktoré sme získali pri štúdiu halogenidov striebra vďaka slovenskej superpočítačovej infraštruktúre boli predmetom šiestich vedeckých publikácií [10, 11, 13, 14, 16], piatich príspevkov na medzinárodných konferenciách [7, 8, 12, 19, 20], jednej bakalárskej práce [17] a jednej diplomovej práce [18].

REFERENCIE

[1] P. J. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jagličić, B. Gaweł, W. Łasocha, and W. Grochala. $Ag^{II}SO_4$: *A Genuine Sulfate of Divalent Silver with Anomalously Strong One-Dimensional Antiferromagnetic Interactions.* Angew Chem. Int Ed Engl., 49(9), 1683-1686 (2010).

[2] A. Grzelak, J. Gawraczyński, T. Jaroń, D. Kurzydłowski, Z. Mazej, P. J. Leszczyński, Vitali B. Prakapenka, M. Derzsi, V. V. Struzhkin and W. Grochala. *Metal fluoride nanowires featuring square-planar building blocks in a high-pressure polymorph of* AgF_2. Dalton Trans. 46, 14742-14745 (2017).

[3] A. Grzelak, J. Gawraczyński, T. Jaroń, D. Kurzydłowski, A. Budzianowski, Z. Mazej, P. J. Leszczyński, Vitali B. Prakapenka, M. Derzsi, V. V. Struzhkin and W. Grochala. *High pressure behavior of silver fluorides up to 40 GPa*. Inorg. Chem., 56 (23), 14651-14661 (2017).

[4] J. Gawraczyński, D. Kurzydłowski, W. Gadomski, Z. Mazej, T. Jaroń, A. Ozarowski, S. Hill, P. J. Leszczyński, K. Tokár, M. Derzsi, P. Barone, K. Wohlfeld, J. Lorenzana and W. Grochala. *The silver route to cuprate analogs.* PNAS, 116 (5) 1495-1500 (2019).

[5] A. Grzelak, M. Derzsi and W. Grochala. *Defect trapping and phase separation in chemically doped bulk* AgF_2. Inorg. Chem. 60, 1561-1570 (2021).

[6] S. Bandaru, M. Derzsi, A. Grzelak, J. Lorenzana, and W. Grochala. *Fate of doped carriers in silver fluoride cuprate analogues*. Phys. Rev. Materials 5, 064801 (2021).

[7] K. Tokár, M. Derzsi. Toward isolated AgF_2 nanowire structure: dynamical and mechanical properties from ab initio. Multiscale Phenomena in Condensed Matter Online conference for young researchers Kraków (YOUNG MULTIS 2021), 5 – 7 July 2021.

[8] K. Tokár, and M. Derzsi. *Dynamical and mechanical properties of single* AgF_2 *nanowire from ab initio.* European Congress And Exhibition On Advanced Materials And Processes – EUROMAT 2021 ONLINE, Stadthalle Gratz, 12 –16 September 2021.

[9] M. A. Domański, M. Derzsi and W. Grochala. *Theoretical study of ternary silver fluorides* $AgMF_4$ *(M = Co, Ni, Cu) formation at pressures up to 20 GPa*. RSC Advances, 11, 25801-25810 (2021).

[10] K. Tokár, M. Derzsi and W. *Computational study of antiferromagnetic and mixed-valent diamagnetic phase of* AgF_2*: crystal, electronic and phonon structure and p-T phase diagram*. Computational Materials Science 188, 110250 (2021).

[11] M. Derzsi, P. Piekarz, K. Tokár and W. Grochala. *Charge ordering mechanism in silver fluoride*. Phys. Rev. B 105, L081113 (2022).

[12] Kamil Tokár, Mariana Derzsi, Wojciech Grochala. *Thermodynamic stability, phonon anharmonicity and electronic response of antiferromagnetic and charge-transfer polymorphs of* AgF_2 *from ab-initio.* Published: 06 November 2020 by MDPI in The 2nd International Online Conference on Crystals session Crystalline Materials (DOI:10.3390/IOCC_2020-07329)

[13] D. Kurzydłowski, M. Derzsi, E. Zurek and W. Grochala. *Fluorides of silver under large compression.* Chem. Eur. J. 27, 5536-5545 (2021).

[14] M. Derzsi, A. Grzelak, P. Kondratiuk, K. Tokár and W. Grochala. *Quest for Compounds at the Verge of Charge Transfer Instabilities: The Case of Silver(II) Chloride*. Crystals, 9(8), 423 (2019).

[15] Adam Grzelak, Jakub Gawraczynski, Mariana Derzsi, Viktor Struzhkin, Maddury Somayazulu, and Wojciech Grochala. *Observation of a New Polyhalide Phase in Ag-*Cl_2 *System at High Pressure.* Crystals, 11, 1565 (2021).

[16] M. Derzsi, M. Uhliar and K. Tokár. *On possible existence of first* $[Ag_6]^{4+}$ *cation in chloride environment.* Chem. Commun. 57, 10186-10189 (2021).

[17] M. Uhliar. Bakalárska práca (2019): *Modelling of chlorine enriched crystal lattice of silver dostupná online na* https://opac.crzp.sk/

[18] M. Uhliar, Diplomová práca (2021): *Modelling of novel crystalline binary silverchloride phases with evolutionary algorithms* zverejnená na https://opac.crzp.sk/

[19] Matej Uhliar, Kamil Tokár, Otto Kohulák, Mariana Derzsi. *Exploring crystal chemistry of binary silver chlorides with evolutionary algorithms and density functional theory.* Published: 06 November 2020 by MDPI in The 2nd International Online Conference on Crystals session Crystalline Materials (DOI:10.3390/IOCC_2020-07332)

[20] M. Uhliar, K. Tokár and M. Derzsi. *Crystal chemistry of novel binary Ag-Cl phases from ab initio: from simple ionic compounds to clustered compounds and silver polychlorides.* European Congress And Exhibition On Advanced Materials And Processes – EUROMAT 2021 ONLINE, Stadthalle Gratz, 12 –16 September 2021.

POČÍTAČOVÉ MODELOVANIE NA ATÓMOVEJ ŠKÁLE PREDSTAVUJE NAJMODERNEJŠÍ PRÍSTUP PRI OBJAVOVANÍ NOVÝCH MATERIÁLOV.

POĎAKOVANIE

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

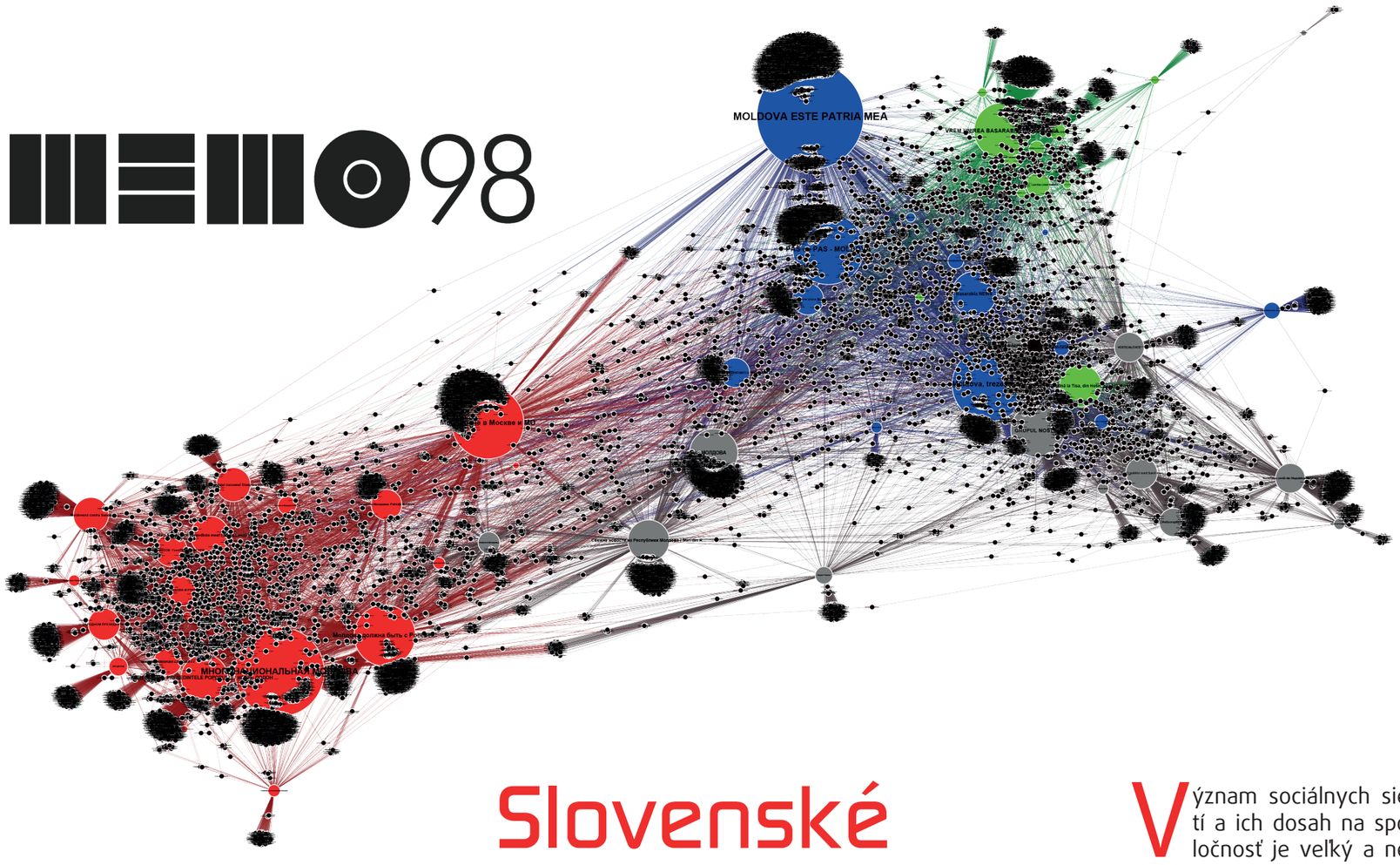
„Nové anorganické zlúčeniny s niklom, paládiom, meďou a striebrom: od DFT modelovania k syntéze pomocou iónových technológií''

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"



Slovenské političky a novinárky na sociálnych sieťach

Rasťo Kužel[1]
Ivan Godársky[1]
Michal Hollý[2]

[1]MEMO98

[2]Centrum spoločných činností SAV, v. v. i., Výpočtové stredisko SAV, Národné kompetenčné centrum pre HPC

MEMO98

MEMO 98 je medzinárodne uznávaná, nezávislá organizácia, ktorá sa špecializuje na monitorovanie a výskum médií, najmä počas volieb. Experti MEMO 98 sa zúčastnili na viac ako 120 volebných pozorovateľských misiách a približne 150 projektoch a školeniach týkajúcich sa médií a volieb vo viac ako 60 krajinách (v krajinách bývalého Sovietskeho zväzu, ako aj na Balkáne, v Afrike, Ázii, Južnej Amerike a na Blízkom východe).

Význam sociálnych sietí a ich dosah na spoločnosť je veľký a neustále rastie. Okrem toho, že sú platformou pre spájanie a udržiavanie kontaktov medzi ich užívateľmi a ich komunitami, sú taktiež dôležitým zdrojom informácií. Tieto informácie sú však ťažko overiteľné a často nepravdivé – navyše sú šírené s cieľom ovplyvniť verejnú mienku. Na základe správy, ktorú každoročne vydáva spoločnosť Kepios Pte. Ltd., bolo v januári 2022 na Slovensku 4,91 milióna používateľov internetu, čo predstavuje asi 90,0 % celkovej populácie. V tej istej správe sa uvádza, že v rovnakom období bolo na Slovensku 4,06 milióna používateľov sociálnych médií, čo predstavuje približne 74,4 % celkovej populácie. Spoločnosť Kepios tiež uvádza, že počet používateľov sociálnych médií na Slovensku sa v rokoch 2021 až 2022 zvýšil o 30 000 (+0,7 %) [1].

Náš projekt bol zameraný na monitorovanie Facebooku, ktorý je na Slovensku najpopulárnejší, konkrétne na šírenie informácií o političkách a novinárkach, najmä v súvislosti s ich pracovnými aktivitami. **Cieľom nášho monitoringu bolo aj vyhodnotiť využívanie stereotypov a dezinformácií voči ženám, či už v kontexte protizápadných a protiamerických nálad, alebo v rámci koordinovaných kampaní proti prominentným političkám a novinárkam a zistiť, do akej miery sú útočníci prepojení s tými, ktorí šíria prokremeľské naratívy.** Monitorovacie obdobie malo rozsah 12 mesiacov (3. máj 2021 – 1. máj 2022) a medzi kritériá výberu političiek a novinárok patrilo vlastníctvo verejného účtu na Facebooku (verejná stránka alebo verejne prístupný osobný profil) a počet sledovateľov (followerov). Z celkovo 11 sledovaných subjektov sa v tomto článku zameriame na 2 slovenské političky (Zuzanu Čaputovú a Veroniku Remišovú) a 2 novinárky (Moniku Tódovú a Zuzanu Kovačič Hanzelovú), pričom celý výskum bude možné nájsť na webovej stránke MEMO98 [2].

Okrem toho, že sú sociálne siete platformou pre spájanie a udržiavanie kontaktov medzi ich užívateľmi a ich komunitami, sú taktiež dôležitým zdrojom informácií.

Nástroj CrowdTangle, pomocou ktorého bol realizovaný zber dát, je produkt spoločnosti Meta (Facebook) vyvinutý za účelom monitorovania, vytvárania štatistických analýz a vyhodnocovania samotnej platformy Facebook pre optimalizáciu či cielenie produktov na používateľov sociálnych sietí. Keďže CrowdTangle sleduje len verejne prístupný obsah a neumožňuje monitorovať súkromné osobné profily ani súkromné skupiny, vo svojej analýze sme sa zamerali na 11 verejných facebookových stránok vybraných subjektov a tiež na vyhľadávanie kľúčových slov v rámci verejných stránok a skupín na slovenskom Facebooku.

Pre spracovanie získaných dát sme vyvinuli skript na mieru v programovacom jazyku Python, aby sme ich mohli ďalej analyzovať. Na výpočty, teda spracovanie dát spoločne s vizualizáciou, bol využitý výpočtový klaster na Ústave experimentálnej fyziky v Košiciach [3], ktorý spravuje Centrum spoločných činností SAV, v. v. i. Na sledovanie šírenia kľúčových slov v rámci skupín alebo stránok sme použili open-source nástroj na mapovanie sietí Gephi [4].

Výsledkom je tzv. sieťová mapa, čo je interaktívna schéma umožňujúca hľadať, klastrovať a analyzovať šírenie špecifických výrazov a webových adries. Dokázali sme teda identifikovať aktérov (facebookové skupiny, stránky, účty), ktorí vykazovali najväčší počet interakcií a zdieľaní príspevkov obsahujúcich skúmané kľúčové slová. Kľúčovými slovami boli v našom prípade mená sledovaných političiek a novinárok.

Sieťové grafy bolo možné použiť aj na identifikáciu:

- ktoré účty zdieľali určité URL adresy najčastejšie,
- ktoré URL adresy sa medzi týmito účtami zdieľali najčastejšie,
- ktoré účty zdieľali obsah najčastejšie medzi sebou (napr. boli zoskupené).

Na sieťovej mape vidíme uzly (nodes) – kruhy a body, ktoré predstavujú facebookové stránky alebo skupiny, ako aj ich prepojenia. Ich veľkosť korešponduje s intenzitou zdieľania (čím väčší uzol, tým väčší podiel zdieľaní určitého obsahu) alebo so zapojením sa do obsahu (čím väčší uzol, tým vyšší počet interakcií s príslušným príspevkom).

Hrany (edges) sú línie, ktoré spájajú uzly. V našom prípade sú hrany spojením medzi entitou a adresou URL, ktorú zdieľala. Použitou metódou nie je možné určiť, či interakcie boli organické alebo vytvorené botmi.

ZUZANA ČAPUTOVÁ

Mgr. Zuzana Čaputová, rod. Strapáková je v poradí piaty prezident Slovenskej republiky. Dňa 6. mája 2019 získala v Bruseli ocenenie Európska osobnosť roka.

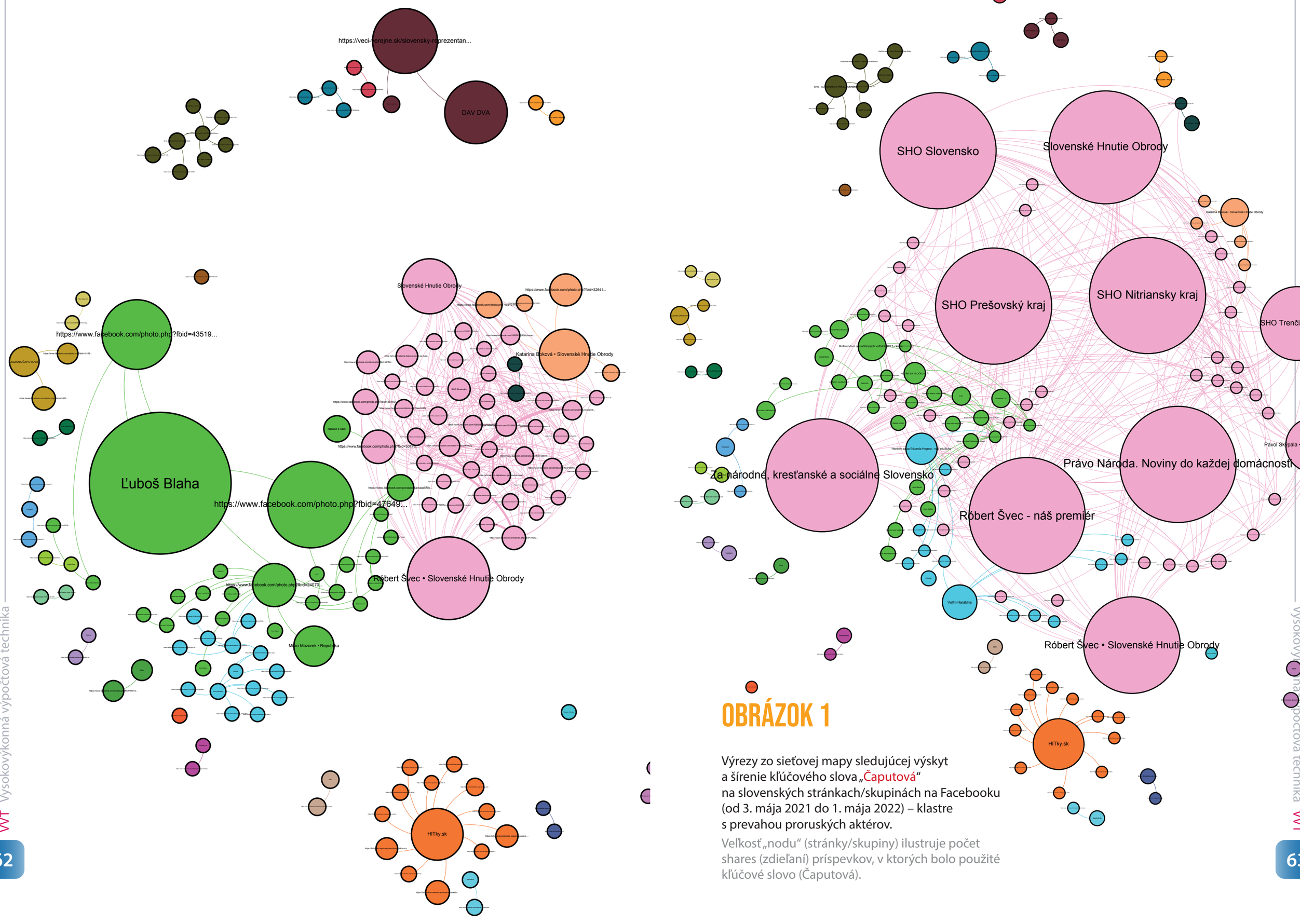
Slovenská prezidentka Zuzana Čaputová sa stala terčom útokov zo strany viacerých aktérov od politických strán až po dezinformačné portály s úzkymi väzbami na extrémistické strany. Najrozsiahlejšie mediálne pokrytie, vrátane sociálnych sietí, mal incident z 1. marca 2022, kedy na verejnej demonštrácii v Nitre organizovanej stranou SMER-SD v súvislosti s prvomájovými oslavami rozvášnil podpredseda strany Ľuboš Blaha zhromaždený dav, ktorý skandoval sexuálne urážky na adresu prezidentky.

Tento incident nebol jednorazovou udalosťou, ale skôr výsledkom dlhodobej negatívnej kampane Blahu a ďalších členov strany SMER-SD proti hlave štátu. Blaha aj Fico na svojich facebookových účtoch pravidelne urážali prezidentku (zradkyňa, americká agentka, agentka cudzej mocnosti, alebo že ju ovládajú Spojené štáty americké).

Rovnako ako v minulosti sa na sociálnych sieťach objavila zmanipulovaná fotografia prezidentky sprevádzaná antisemitickým a protiamerickým textom, na ktorom ju známy extrémista s úzkymi väzbami na stranu Republika zosmiešňoval pre jej fyzický vzhľad. Zo zoznamu prokremeľských aktérov, ktorý zostavila spoločnosť Gerulata Technologies [5], sa na ňu zameralo mimoparlamentné Slovenské hnutie obrody (SHO), ktoré sa netají sympatiami k fašistickému vojnovému slovenskému štátu, orientuje sa euroskepticky a požaduje odchod Slovenska z euroatlantických štruktúr.

Monitoring tiež zistil, že prezidentka bola terčom útokov facebookových stránok DAV DVA a ďalších médií známych šírením dezinformácií vrátane Inenoviny.sk, Informácie bez cenzúry a ďalších.

Zdroj: TASR – Martin Baumann



OBRÁZOK 1

Výrezy zo sieťovej mapy sledujúcej výskyt a šírenie kľúčového slova „Čaputová“ na slovenských stránkach/skupinách na Facebooku (od 3. mája 2021 do 1. mája 2022) – klastre s prevahou proruských aktérov.

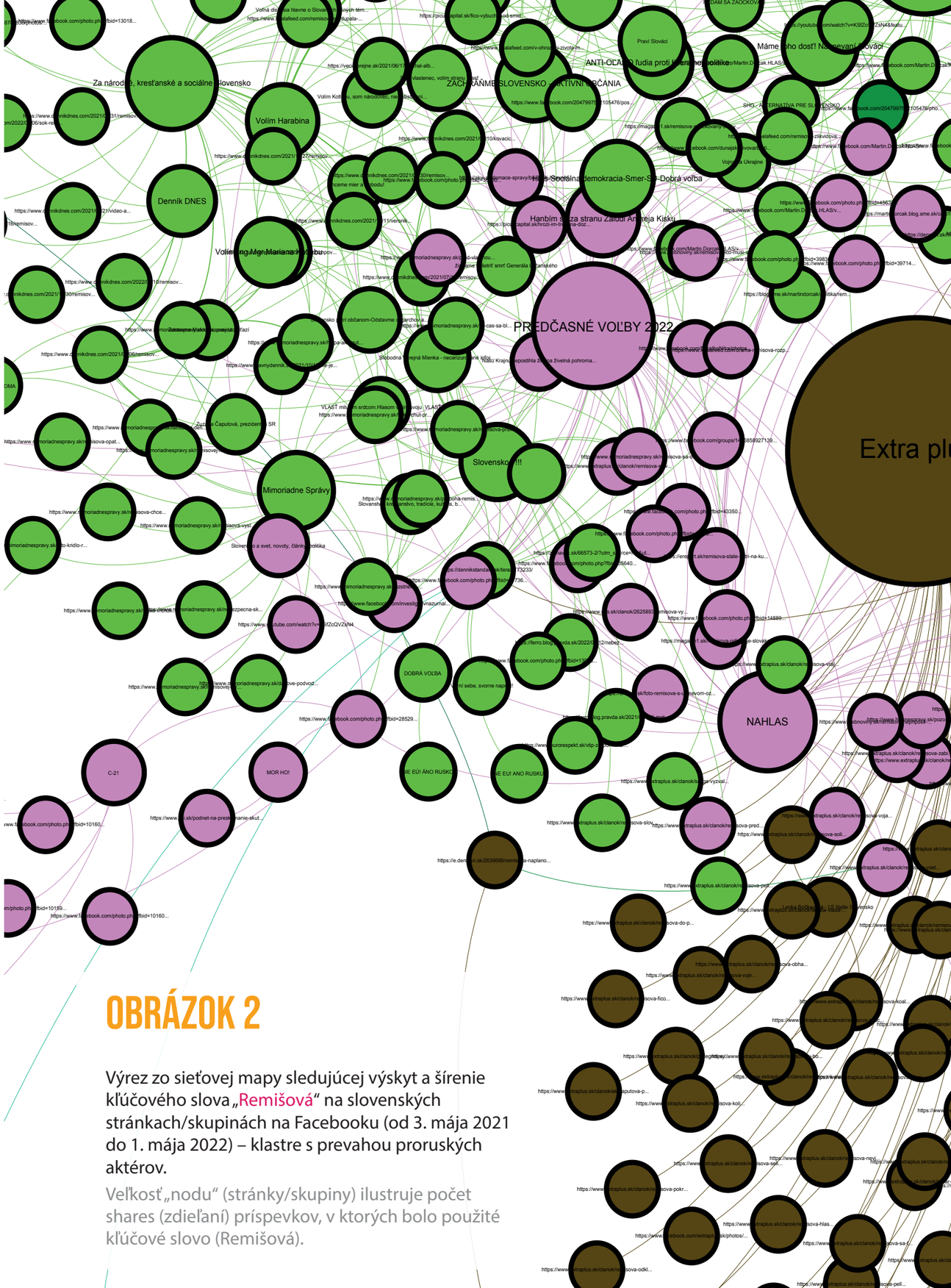
Veľkosť „nodu“ (stránky/skupiny) ilustruje počet shares (zdieľaní) príspevkov, v ktorých bolo použité kľúčové slovo (Čaputová).

Mgr. art. Veronika Remišová, ArtD., M.A., rod. Belošovičová je slovenská političa, predsedníčka politickej strany ZA ĽUDÍ, podpredsedníčka vlády Slovenskej republiky a ministerka investícií, regionálneho rozvoja a informatizácie SR vo vláde Eduarda Hegera.

VERONIKA REMIŠOVÁ

Podpredsedníčka vlády SR a ministerka investícií, regionálneho rozvoja a informatizácie Veronika Remišová sa počas monitorovaného obdobia prezentovala ako silne proeurópska političa s mimoriadne aktívnym obsahom na vlastnej facebookovej stránke. Táto profilácia sa po ruskej invázii na Ukrajinu prehĺbila a zintenzívnila – podľa výsledkov analýzy Vojna na Ukrajine, ktorú realizovalo MEMO 98, mala Veronika Remišová druhý najvyšší počet príspevkov (66) spomedzi predsedov slovenských parlamentných strán. 58 z nich sa týkalo vojny a jej dôsledkov, pričom 46 z nich bolo výrazne podporujúcich Ukrajinu a s ňou súvisiace domáce slovenské opatrenia (tretí najvyšší počet), pričom V. Remišová nepublikovala ani jeden post zameraný proti Ukrajine.

Takýto silne proeurópsky postoj našiel svoju „odozvu“ medzi proruskými aktérmi – mnohí z nich sa zamerali na kritiku Veroniky Remišovej, najmä Extra plus, Volím Harabina, Slovensko-ruská spoločnosť, Eduard Chmelár, Slobodný vysielač, Nocomment.sk, či rôzne stránky SHO a Róbert Švec. Tieto zoskupenia boli prepojené s politikmi Mariánom Kotlebom a Ľubošom Blahom. Ďalšími dôležitými aktérmi v tomto smere boli Hlavný denník, DAV DVA, Hlavné správy a Blog investigatívnej žurnalistiky.



OBRÁZOK 2

Výrez zo sieťovej mapy sledujúcej výskyt a šírenie kľúčového slova „Remišová“ na slovenských stránkach/skupinách na Facebooku (od 3. mája 2021 do 1. mája 2022) – klastre s prevahou proruských aktérov.

Veľkosť „nodu“ (stránky/skupiny) ilustruje počet shares (zdieľaní) príspevkov, v ktorých bolo použité kľúčové slovo (Remišová).

Zdroj: bielavrana.sk

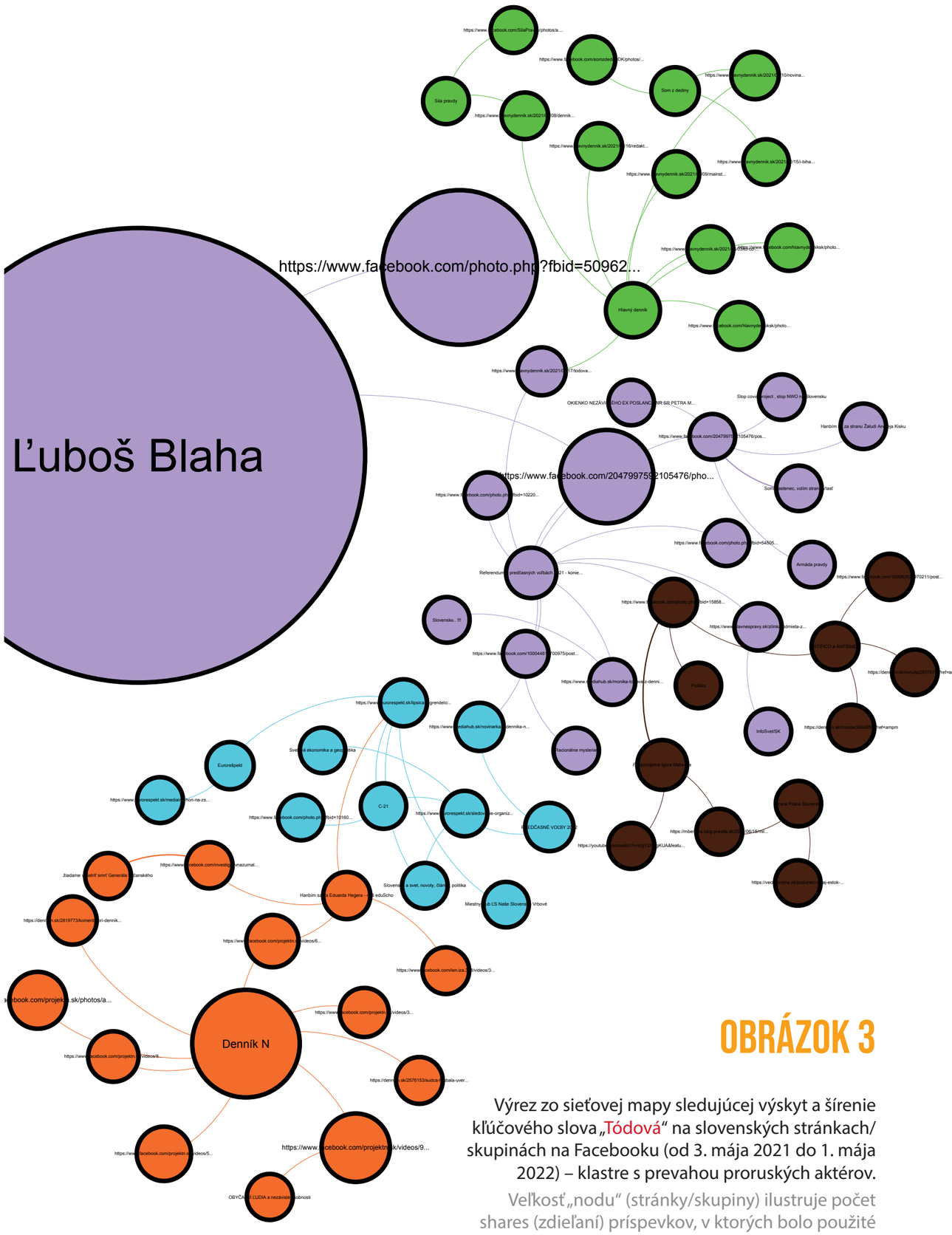
MONIKA TÓDOVÁ

Slovenské novinárky sa stali terčom dehonestujúcich, vulgárnych a sexistických útokov a to predovšetkým zo strany politikov, ktorí boli predmetom ich investigatívnych reportáží. Najmä novinárka Denníka N Monika Tódová sa opakovane stala terčom sexistických urážok a útokov zo strany politikov strany SMER-SD. Pri pokrývaní tém súvisiacich s korupciou a nekalými praktikami predchádzajúcej vlády pod vedením SMER-SD verejne priznala, že dostávala vyhrážky a nenávistné správy, pričom útočníci si želali, aby skončila ako Ján Kuciak, nazývali ju Sorošovou dievčinou, alebo komentovali jej fyzický vzhľad.

Mgr. Monika Tódová, rod. Žemlová je slovenská novinárka, súčasná redaktorka Denníka N (od roku 2014), laureátka ocenenia Biela vrana (2018) a niekoľkonásobná laureátka ocenenia Novinárska cena (2008-2021).

Zdroj: SME – Marko Erd

V monitorovanom období sa stala terčom útokov najmä zo strany Ľuboša Blahu, Milana Uhríka, Eduarda Chmelára, Martina Daňa a jeho portálu Ginn a ďalších.



OBRÁZOK 3

Výrez zo sieťovej mapy sledujúcej výskyt a šírenie kľúčového slova „Tódová“ na slovenských stránkach/skupinách na Facebooku (od 3. mája 2021 do 1. mája 2022) – klastre s prevahou proruských aktérov.

Veľkosť „nodu“ (stránky/skupiny) ilustruje počet shares (zdieľaní) príspevkov, v ktorých bolo použité kľúčové slovo (Tódová).

Zdroj: SME – Jozef Jakubčo

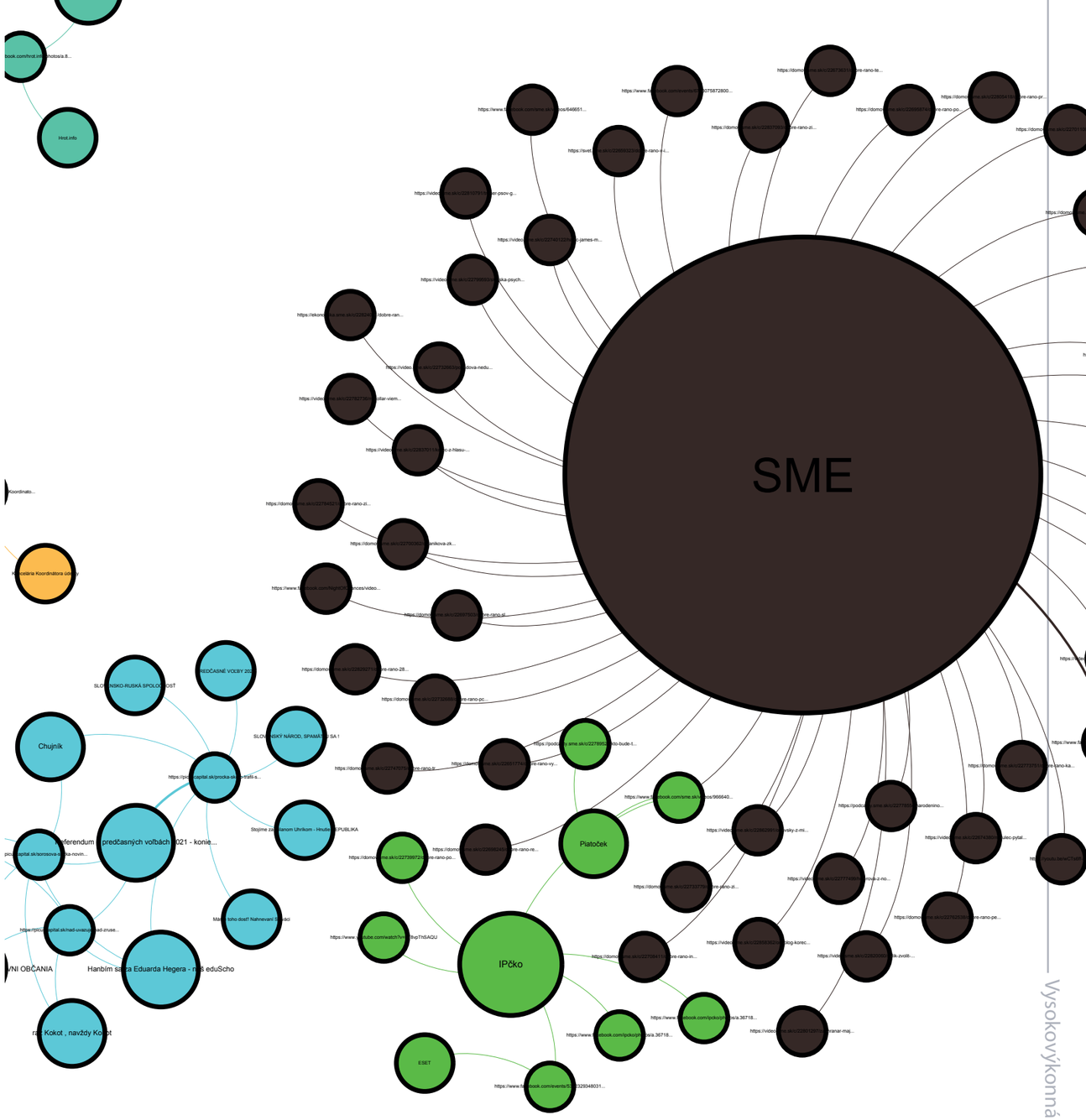
ZUZANA KOVAČIČ HANZELOVÁ

Zuzana Kovačič Hanzelová sa narodila 2. júla 1988 v Bratislave. Študovala žurnalistiku na Univerzite Konštantína Filozofa v Nitre. Venuje sa najmä politike, témam chudoby a sexuálneho obťažovania. Je laureátkou ocenenia Novinárska cena (2021).

Ďalšia prominentná novinárka Zuzana Kovačič Hanzelová sa sťažovala na prijímanie podobných správ, ktoré ju 17. decembra 2021 prinútili prestať používať svoje konto na Facebooku (naďalej používa svoje konto na Instagrame). Vo svojom rozlúčkovom príspevku poukázala na viaceré znepokojujúce tendencie, ktoré boli hlavnými dôvodmi jej rozhodnutia, vrátane trollingu zo strany prokremeľských aktérov.

Výsledky nášho monitoringu indikujú, že v monitorovanom období sa k Zuzane Kovačič Hanzelovej na Facebooku vyjadrovali rôzni aktéri od médií, cez politické strany a osobnosti až po kultúrne centrá a občianske iniciatívy. Zároveň sa zapojili aj antisystémové subjekty, aj keď väčšinou skôr roztrieštene (Hlavný denník, Artur Bekmatov, Zdroj, hlavnespravy.sk, Portál Kulturblog, Extra Plus, Slovanské Noviny, Anna Belousovová, Kancelária Koordinátora úderky). Azda jedinou výnimkou bolo zoskupenie občanov a skupín, ktorých hnacím motorom bol nesúhlas so súčasným politickým zriadením a jeho hlavnými protagonistami. Z mapy vyplýva, že tento klaster obsahuje aj rôzne prokremeľské subjekty, ako napríklad Picuscapital.sk, Slovensko-ruská spoločnosť, Som vlastenec, volím stranu Vlasť, Stojíme za Milanom Uhríkom – Hnutie REPUBLIKA.

Zdroj: domov.sme.sk



OBRÁZOK 4

Výrez zo sieťovej mapy sledujúcej výskyt a šírenie kľúčového slova „Kovačič Hanzelová“ na slovenských stránkach/skupinách na Facebooku (od 3. mája 2021 do 1. mája 2022) – klastre s prevahou proruských aktérov.

Veľkosť „nodu“ (stránky/skupiny) ilustruje počet shares (zdieľaní) príspevkov, v ktorých bolo použité kľúčové slovo (Kovačič Hanzelová).

ZISTENIE

Skutočnosť, že na Slovensku pôsobí prokremeľská propaganda priznali štátne inštitúcie už v roku 2016, keď ministerstvo vnútra oficiálne uviedlo, že „Slovensko, podobne ako iné štáty strednej a východnej Európy, sa stalo predmetom informačného ovplyvňovania zo strany vplyvových štruktúr Ruskej federácie“. V novoprijatej Bezpečnostnej stratégii do roku 2021 sa ďalej uvádza, že „škodlivá strategická propaganda vrátane dezinformačných aktivít má potenciál polarizovať spoločnosť, rozvracať politický systém, podkopávať dôveru a vôľu občanov brániť demokratický a právny štát a spochybňovať význam členstva Slovenskej republiky v NATO a EÚ“.

Identifikovaní aktéri, ktorí šíria dezinformácie, pôsobia na slovenskom internete a sociálnych sieťach už niekoľko rokov a šíria nacionalistický, proruský, a protiimigračný pohľad na svet, sú proti EÚ/NATO/USA a často podporujú pravicovú, nacionalistickú agendu. Podporovali krajne pravicovú stranu Kotlebovci – Ľudová strana Naše Slovensko (SNS), hnutie Republika (vzniklo z odídencov z ĽSNS), ako aj Slovenské hnutie obrody.

Ich aktivity voči političkám a novinárkam však doteraz neboli systematickejšie skúmané. Použili sme zoznam prokremeľských aktérov, ktorý zostavila spoločnosť Gerulata Technologies [5] a porovnali ho so zisteniami z nášho monitoringu médií. Zistili sme, že zo 14 aktérov z tohto zoznamu, ktorí majú stránku na Facebooku a sú označení v troch hlavných kategóriách hrozieb, sa v našich zisteniach vyskytovalo 13 aktérov, ktorí sa zúčastňovali na negatívnych kampaniach proti skúmaným političkám a novinárkam.

Gerulata Technologies

Top Pro-Russian Sources in Slovakia

Gerulata Node ID	Title	Type	Activity Category	Impact Category	Influence Category	Threat Category
3345509527	Ľuboš Blaha	Facebook Page	medium	catastrophic	extreme	catastrophic
9621918752	Slobodný vysielač	Facebook Page	high	high	extreme	catastrophic
2722275368	Veľvyslanectvo Ruska na Slovensku/ Посольство России в Словакии	Facebook Page	extreme	medium	extreme	extreme
8799273843	Extraplus (extraplus.sk)	Web	extreme	n/a	extreme	extreme
4952167164	Tomáš Taraba - predseda ŽIVOT NS	Facebook Page	medium	extreme	high	extreme
911785421	DAV DVA	Facebook Page	extreme	high	medium	extreme
9357350490	Hlavné Správy	Facebook Page	high	medium	high	extreme
3390562675	nocomment.sk	Facebook Page	medium	high	high	extreme
8515467263	Hlavný denník (hlavnydennik.sk)	Web	high	n/a	high	extreme
6955415866	Slovenské Hnutie Obrody	Facebook Page	medium	medium	extreme	high
8766189209	Milan Uhrík • Republika	Facebook Page	low	extreme	extreme	high
7558265631	Blog investigatívnej žurnalistiky	Facebook Page	extreme	medium	medium	high
6256802347	Hlavné správy (hlavnespravy.sk)	Web	extreme	n/a	medium	high
4587968579	Hlavný denník	Facebook Page	catastrophic	high	low	high
3559939781	Eduard Chmelár	Facebook Page	low	high	extreme	high
7492753507	Štefan Harabin	Facebook Page	low	high	extreme	high
2213788472	Róbert Švec • Slovenské Hnutie Obrody	Facebook Page	medium	medium	high	high
9140108057	MAGAZÍN 1 (magazin1.sk)	Web	medium	n/a	high	high

Zdroj: https://www.gerulata.com/docs/gerulata_top_pro_russian_sources.pdf

Identifikovaných 13 aktérov dezinformácií možno rozdeliť do dvoch hlavných kategórií – 7 politických subjektov (politikov alebo strán, či už súčasných alebo bývalých) a 6 dezinformačných portálov.

Zo 7 politikov alebo strán bol na Facebooku najviditeľnejší podpredseda strany SMER-SD Ľuboš Blaha, ktorý mal obrovský počet sledovateľov až do 14. júna, keď mu Meta zrušila verejnú stránku pre opakované porušovanie komunitných štandardov. Medzi aktívnych šíriteľov prokremeľskej propagandy na našom zozname patrí aj nezaradený poslanec Tomáš Taraba, ktorý kandidoval na kandidátke fašistickej strany Kotlebovci – Ľudová strana Naše Slovensko do parlamentných volieb 2020, Milan Uhrík z Republiky (predtým Kotlebovci – Ľudová strana Naše Slovensko), Róbert Švec (predseda nacionalistického Slovenského hnutia obrody), vysokoškolský učiteľ a bývalý politik Eduard Chmelár a bývalý predseda Najvyššieho súdu SR a minister spravodlivosti (vo vláde Roberta Fica) Štefan Harabin.

Pokiaľ ide o ďalších aktérov zo spomínaného zoznamu, nachádzajú sa tu aj Slobodný vysielač, DAV DVA, Hlavné správy, Nocomment.sk, Blog investigatívnej žurnalistiky a Hlavný denník.

Boj s dezinformáciami je mimoriadne náročný a vyžaduje si komplexný prístup na viacerých úrovniach od vzdelávania a podpory kritického myslenia po monitorovanie a reguláciu obsahu na internete. Najmä po začiatku ruskej agresie na Ukrajine začali viaceré štáty vrátane Slovenska blokovať dezinformačné stránky. Národný bezpečnostný úrad (NBÚ) disponuje touto právomocou na základe zákona č. 69/2018 Z. z. o kybernetickej bezpečnosti do 30. septembra 2022. Donedávna boli blokované štyri stránky – Hlavné správy, Armádny magazín, Hlavný denník a Infovojna.

Zároveň NBÚ predložil na pripomienkovanie novelizáciu vyššie uvedeného zákona o kybernetickej bezpečnosti, ktorý v prípade schválenia zavádza lepšie pravidlá pre blokovanie webových stránok. Návrh na blokovanie by mal pochádzať od oprávneného subjektu presadzovania práva (nie od samotného NBÚ) a ďalej by ho mal schvaľovať súd. Účinnosť by mal nadobudnúť počas jesene 2022.

REFERENCIE

[1] https://datareportal.com/reports/digital-2022-slovakia

[2] https://memo98.sk/

[3] Výpočty boli realizované s využitím výpočtovej infraštruktúry projektu SIVVP – Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie, projekt ITMS 26230120002 a 26210120002, ktorý bol podporený v rámci Operačného programu Veda a Výskum financovaného z ERDF.

[4] Bastian M., Heymann S., Jacomy M. (2009). Gephi: an open source software for exploring and manipulating networks. International AAAI Conference on Weblogs and Social Media.

[5] https://blog.gerulata.com/russian-propaganda-network-in-slovakia/, https://www.gerulata.com/docs/gerulata_top_pro_russian_sources.pdf

03

Popularizácia HPC

hpc focus

EuroCC
medzinárodná spolupráca

Twinning Slovensko – Česká republika

Národné kompetenčné centra pre HPC z Českej republiky a Slovenska zorganizovali počas jarných mesiacov 2 twinningové podujatia.

S cieľom výmeny najlepšej praxe a prístupov k poskytovaniu cloudových služieb HPC používateľov z akademickej obce, ale aj priemyslu sme sa stretli 19. apríla na Smolenickom zámku na Slovensku so zástupcami zo združenia CESNET (M. Ruda, D. Antoš) a IT4I (B. Jansík, T. Karásek).

Druhý workshop bol zameraný na tzv. inžinierske aplikácie, teda pokročilé modelovanie napríklad komplexnej dynamiky kvapalín, turbulencií, prenosu tepla, akustiky a mechaniky. Workshopu sa zúčastnili aj zástupcovia súkromných firiem, takže súčasťou bolo aj krátke predstavenie kompetenčného centra, projektu EuroCC a možností pre využitie HPC prístupu a služieb na Slovensku a v Európe. O úspešných spoluprácach v oblasti inžinierskych aplikácií predovšetkým s malými a strednými podnikmi sme debatovali s T. Karáskom a T. Brzobohatým.

Twinning Slovensko – Slovinsko

Slovenské Národné kompetenčné centrum pre HPC nadviazalo spoluprácu so Slovinským kompetenčným centrom v oblasti vzdelávania. Spolupráca odštartovala online workshopom, kde obe kompetenčné centrá predstavili svoje aktivity, najmä v oblasti vzdelávacích aktivít. Následne zorganizovali spoločné online kurzy pre účastníkov z oboch krajín, ktoré pokračujú na jeseň 2022. Viac informácií na našej stránke.

Krátke správy

EuroCC 2
– kompetenčné centrum pokračuje

V januári 2023 štartuje projekt EuroCC 2, v rámci ktorého realizujeme aktivity Národného kompetenčného centra pre HPC. Hostiteľskou inštitúciou bude po novom Národné superpočítačové centrum. Projekt sa počas nasledujúcich troch rokov bude sústrediť 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.

TREX CoE Letná škola
Quantum Monte Carlo

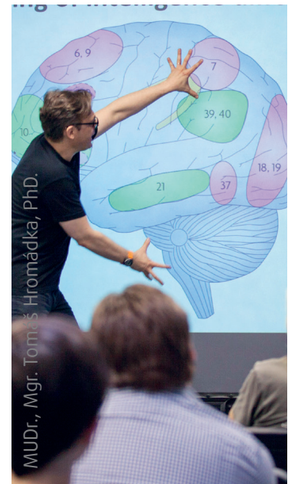
Európske centrum excelentnosti v exascale počítaní TREX v spolupráci s Fyzikálnym ústavom SAV a Národným kompetenčným centrom pre HPC organizovalo workshop zameraný na metódy kvantového Monte Carla (Quantum Monte Carlo, QMC).

Workshop prebiehal prezenčne na Slovensku v kaštieli Mojmírovce a účastníci mali možnosť získať komplexný teoretický prehľad aj praktické skúsenosti s metódami kvantového Monte Carla a ich aplikáciou na molekulárne (kódy Quantum Package and CHAMP) a periodické systémy (TurboRVB). Prednášky a školenia viedli poprední svetoví odborníci, ktorí sú súčasťou európskeho centra excelentnosti TREX.

TREX
Targeting Real chemical accuracy at the EXascale

Popularizačné prednášky
– prídite sa pozrieť a dozvediete sa viac

NCC pre HPC organizuje počas semestra popularizačno-náučné prednášky na rôzne témy súvisiace s vysokovýkonným počítaním. Zaujímavé príspevky na tému umelej inteligencie a jej uplatnenia v rôznych oblastiach si môžete pozrieť zo záznamu v našom archíve. V ďalšom semestri vám prinesieme prednášky slovenských odborníkov na kvantové technológie – sledujte našu stránku a sociálne médiá!



eurocc.nscc.sk

hpc focus

2022

RIADITEĽ CSČ SAV
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.

ZODPOVEDNÝ REDAKTOR
RNDr. Lucia Demovičová, PhD.

GRAFIKA A DTP
RNDr. Gabriela Obadalová

FOTOGRAFIE
Ing. Pavol Novák
Ing. Michal Kadúc
Shutterstock

PERIODICITA
Raz ročne

VYDAVATEĽ
Centrum spoločných činností SAV, v. v. i.
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

TLAČ
FO ART, s. r. o.
Prešovská 45
821 02 Bratislava
Slovenská republika
Tel.: +421 (0)2/4463 5612
E-mail: foart@foart.sk
www.foart.sk

ISBN 978-80-89871-13-1
ISSN 2729-9090

Texty neprešli jazykovou korektúrou.

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

Dúbravská cesta 9
845 35 Bratislava
Slovenská republika

www.vs.sav.sk

ISBN 978-80-89871-13-1
ISSN 2729-9090