

Memorandum o spolupráci

Účastníci:

- (1) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství (Nositel a leader host institution LRI RIME21)

Vysoké učení technické v Brně

Sídlem: Antonínská 548/1, 601 90 Brno - Veverčí

IČ/DIČ: 00216305/CZ00216305

- (2) Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, VŠ ústav IT4Innovations národní superpočítačové centrum (součást velké výzkumné e-infrastruktury České republiky s názvem e-INFRA CZ)

Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava

Sídlem: 17. listopadu 2172/15, 708 00 Ostrava – Poruba

IČ/DIČ: 61989100/CZ61989100

Preamble:

- (3) Nově navrhovanou velkou výzkumnou infrastrukturou (LRI) je Výzkumná infrastruktura pro strojní inženýrství 21.století (Research Infrastructure for 21st century Mechanical Engineering (RIME21)). RIME21 je distribuovaná výzkumná infrastruktura tvořená „single point access“ (SPA) a jednotlivými uzly (NODES).
- (4) IT4Innovations národní superpočítačové centrum (dále jen IT4I) je předním výzkumným, vývojovým a inovačním centrem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC), datových analýz (HPDA) a umělé inteligence (AI), provozující nejvýkonnější superpočítačové systémy v České republice. IT4I společně s institucemi CESNET a CERIT-SC tvoří strategickou výzkumnou infrastrukturu České republiky [e-INFRA CZ](#). Součástí IT4I jsou rovněž laboratoř vývoje paralelních algoritmů, laboratoř výzkumu infrastruktury, laboratoř modelování pro nanotechnologie, laboratoř pro big data analýzy a laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace.
- (5) S přihlédnutím ke kapacitám tvořící LRI RIME21, s ohledem na jejich dosavadní odborné výkony a s ohledem na výzkumné oblasti navrhované v rámci konsolidace LRI RIME21, byly identifikovány tematické okruhy možného využití kapacit IT4I. Tematické okruhy současně tvoří odborný základ pro výzkumné, vývojové a technologické projekty ve vzájemné spolupráci (kolaborativní výzkum, spoluautorské výsledky), a to jak ve vztahu k rozvoji technologií, tak také expertíz obou výzkumných infrastruktur. Tematické okruhy jsou indikativně vymezeny v Příloze 1 tohoto Memoranda.

Východiska spolupráce

- (6) Schválením Memoranda všemi zúčastněnými stranami se vytváří podmínky pro úzkou spolupráci a koordinaci společných postupů a aktivit účastníků směřujících k přípravě a realizaci kolaborativních výzkumných projektů a/nebo projektových přístupů k výzkumné infrastruktuře IT4I ze strany RIME21, resp. jejich jednotlivých uzlů.
- (7) Spolupráce je založena na zásadě dobrovolnosti. Autonomie stran nebude při naplňování společných cílů tímto Memorandem dotčena.

Cíle spolupráce

- (8) Formulace projektů kolaborativní spolupráce v návaznosti na zaměření laboratoří IT4I a výzkumných oblastí RIME21. Kalibrace možností a využitelnosti odborných i technologických kapacit IT4I ve vztahu k výzkumným úlohám, společným integračním projektům členů konsorcia RIME21 a potřebám uživatelů RIME21.
- (9) Zefektivnění přístupu ke kapacitám, tj. výzkumné infrastruktuře IT4I formou přístupových projektů RIME21, resp. jednotlivých uzlů RIME21 za podpory centrálního rozpočtu RIME21, předkládaných v rámci open access pravidel IT4I.
- (10) Rozvoj digitalizace a pokročilých technologií pro průmyslové, zejména potom strojírenské aplikace. Využití open source nástrojů IT4I, diseminace a uplatnění postupů využívající open source nástroje.
- (11) Systémová podpora (zdroje pro networking, výpočty, management dat, analýzy velkých dat, zapojení AI apod.) pro vývoj digitálních produktů, datových sad, databází, digitálních dvojčat, materiálových modelů, protokolů pro aditivní technologie, modelů strojních kontaktů, a dalších prostředků pro účely dálkového zpřístupnění technologií a postupů uživatelům.

Ustanovení společná a závěrečná

- (12) Toto Memorandum o vzájemné spolupráci nepředstavuje mezi stranami smlouvu, ani smlouvu o smlouvě budoucí a není právně závazné. Předmluvní odpovědnost dle §§ 1728 a 1729 občanského zákoníku je vyloučena.
- (13) Účastníci budou vhodným způsobem informovat své členy, spolupracovníky a orgány o přijetí Memoranda a o obsahu spolupráce.
- (14) Memorandum je uzavíráno jako elektronický originál, po jehož podpisu každá ze smluvních stran obdrží vyhotovení.
- (15) Memorandum pozbývá platnosti písemnou dohodou stran nebo doručením písemného oznámení jedné ze stran, že se Memorandem nehodlá nadále řídit.

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan Fakulty strojního inženýrství, VUT v Brně

doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.
ředitel VŠ ústavu IT4Innovations, VŠB - TUO

Příloha 1: Indikativní vymezení tematických okruhů možné spolupráce

V oblasti materiálového výzkumu, resp. materiálového inženýrství jde zejména o vývoj metod k pochopení i predikci vlastností materiálů na základě výpočetních modelů. Okruhy možné spolupráce:

- i. Vývoj kvantově-mechanického multiškálového softwaru SPRKKR pro popis elektronových, magnetických a spektroskopických vlastností 2D a 3D materiálů a na předpovědi vlastností funkčních materiálů pro senzorické aplikace. SARPEs ve spolupráci Mnichovskou univerzitou LMU (Ludwig-Maximilians-Universität München).
- ii. Řešení realistických výpočetních modelů ve výzkumu vlastností materiálů pro klasickou i molekulární elektroniku, mechatronické systémy, optoelektroniku, fotoniku a spintroniku v rozsahu obsahujících stovky až tisíce atomů (výzkum feroelektrických materiálů, magnetických slitin a ocelí).
- iii. Využití expertíz IT4I pro paralelizaci a optimalizaci vyvíjených SW nástrojů a zapojení algoritmů umělé inteligence do materiálového výzkumu (s využitím systému NVIDIA DGX-2) a spolupráce v rámci IT4I „flagship“ na výzkumné aktivitě „Návrh materiálů – blíže realitě prostřednictvím exascalových výpočtů/ Material Design – Towards Reality via Exascale Computing“ (Dr. D. Legut). Spolupráce s IT4I se již rozvíjí viz. např. připravovaná publikace do časopisu PNAS (Kurleto, Legut et al. Effects of momentum dependent hybridization in CeCoIn5).
- iv. Numerické simulace pro komplexní virtuální analyzování kompozitních struktur, zejména v mikro, nano a atomistickém měřítku; zrychlení výpočtů pro numerické hybridní analýzy, např. spojování simulací hybridní molekulární dynamiky (MD) s konečně prvkovými modely (FEM, XFEM).
- v. Pokročilé výpočty a detailnější objasnění mezifázového rozhraní polymerních kompozitů (vlákno – matrice, vlákno – nanočástice – matrice); problematika biodegradability kompozitních vláknových struktur.
- vi. Využití možností SW platformy DIGIMAT pro materiálové modelování k provádění podrobných analýz materiálů na mikroskopické úrovni a k odvození mechanických materiálových modelů.

V oblasti mechaniky materiálů a technické mechaniky jde zejména o modelování vzniku a rozvoje materiálových vad, defektů, únavových poškození, tření a chování materiálů při tepelném zatížení. Významnou problematikou je rozvoj metod k modelování jevů proudění. Okruhy možné spolupráce:

- i. Sestavování komplexních matematických modelů popisujících deformační odpor kovových materiálů, resp. diagramy anizotermického rozpadu austenitu v závislosti na chemickém složení oceli a termomechanických parametrech ovlivňujících výchozí mikrostrukturu.
- ii. Propojování modelů mechanické odezvy a degradace v rámci numerických modelů na bázi MKP pro výzkum fenomenologických modelů zejména nízkocyklové únavy a tvárného porušování.
- iii. Více-škálové modely materiálů – modelování materiálových vlastností nových materiálů, modelování vzniku a rozvoje materiálových vad, predikce teoretických vlastností materiálů.
- iv. Využití výpočetní kapacity pro náročné strukturní konečnoprvkové výpočty (systém Ansys).
- v. Numerické modelování na makro-úrovni chování materiálů a komponent s defekty. Studium vzniku a rozvoje defektů v oblasti křehkého porušení materiálů, šíření únavových trhlin či při porušení vlivem creepu. Studium chování materiálů při tepelném zatížení či termo-mechanické únavě.
- vi. Využití výpočetní kapacity v oblasti tribologie pro molekulární dynamické simulace problému mazání, kde je výkon výpočetního systému limitujícím faktorem.

- vii. Pokračování již rozběhlé spolupráce s IT4I na rozvoji nových výpočetních přístupů u modelování jevů proudění pomocí metody Lattice Boltzmann a také pro rozvoj implementace této metody. Spolupráce s IT4I pro vysoce výkonné počítání a expertízu při nastavování mnohovláknových úloh.
- viii. Komplikované nestacionární dvoufázové proudění, přítomné prakticky ve všech typech trysek, vyžaduje extrémní výpočetní výkon a detailní znalost řešiče (rychlé a přesné prototypování trysek bez nutnosti jejich výroby).
- ix. Ověřování a ladění výpočetních modelů experimentálním měřením na reálných mechanismech a strojích, zejména pro získávání okrajových podmínek, za účelem přibližování simulovaného chování realitě.

V oblasti výroby a systémů se jedná zejména o modely a simulace související s technologiemi aditivní výroby, virtuálním prototypováním, vývojem digitálních dvojčat, a implementace CPS systémů v rámci výrobních systémů. S rozvojem IoT v prostředí 5G (6G) sítí roste potřeba řešení kybernetické bezpečnosti. Okruhy možné spolupráce:

- i. Komplexní úlohy pro aditivní technologie pro počítačové simulace depozice součástí pro dosažení co nejlepší tvarové přesnosti a minimalizaci zbytkových pnutí i pro verifikace zjednodušených modelů.
- ii. Simulace přenosu tepla v procesu 3D tisku k predikci tepelných dilatací a distorzí tištěné součástky (popřípadě k vytvoření algoritmu, který bude tyto deformace predikovat).
- iii. Tvarová a topologická optimalizace pro aditivní technologii – stanovení topologické optimalizace tvaru pro využití maximálního potenciálu aditivní technologie.
- iv. Zpracování mračna bodů získaných 3D skenováním – využití výpočtového výkonu superpočítače při analýze a zpracování mračna bodů získaných 3D skenerem nebo CMM strojem.
- v. Simulace reálných podmínek provozu – výpočetně náročné simulace pro optimální řešení konstrukcí bez tvarových zjednodušení pro nahrazení laboratorních měření virtuálním modelem, což vede k urychlení procesu návrhu součástí a celků a umožňuje posouzení dopadu jednotlivých změn na jeho funkčnost bez nutnosti vytvářet fyzický prototyp.
- vi. Predikce jednotlivých výrobních procesů prostřednictvím digitálních dvojčat. Zpracování a analýza empirických dat z procesů při výzkumu technologií DMLS, WAAM a laserových technologií včetně vizualizace modelu tepelného ovlivnění materiálů různými zdroji tepla (el. oblouk, indukční ohřev, plazmatický oblouk, laser), simulování tepelného ovlivnění s postupnou verifikací na zařízeních a pomocí strukturních, mechanických a optických dat.
- vii. Kybernetická bezpečnost a internet věcí v prostředí 5G lokálních sítí.
- viii. Spolupráce v implementaci metamateriálů do současných strojních součástí a pro optimalizační proces s cílem implementace multidisciplinárního přístupů k vývoji CPS systémů, především pro aplikace virtuálních dvojčat a monitorování, či diagnostiky kritických aplikací (energetika, letectví).
- ix. Výpočtové úlohy pro analýzu pohybu a interakce velkého množství částic v komplikovaných geometriích pro predikci chování velkého množství částic pro konstrukční návrh zařízení.