



Centrum  
přírodovědných  
a technických oborů

Univerzita J. E. Purkyně v Ústí n. L.  
Přírodovědecká fakulta UJEP  
Pasteurova 3632/15  
400 96 Ústí nad Labem

**doc. RNDr. Filip Moučka, Ph.D.**

E-mail: filip.moucka@ujep.cz

Tel.: +420 475 286 636

Kancelář: 2.02

**doc. RNDr. Marek Malý, Ph.D.**

E-mail: marek.maly@ujep.cz

Tel.: +420 475 286 651, +420 603 395 987

Kancelář: 2.25

## POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ A HIGH-PERFORMANCE COMPUTING

### PŘEDSTAVENÍ VÝZKUMU/TECHNOLOGIE

Počítačové modelování představuje **moderní nástroj vhodný pro predikci či objasnění chování soustav a jevů** v nich probíhajících, který je založen na příslušných teoretických modelech a jejich softwarové implementaci. Dále tento obor zahrnuje **zpracování signálů, včetně obrazu, statistické vyhodnocení dat a řešení rozličných optimalizačních problémů**. Jedná se o problémy z různých oblastí vědy, techniky, managementu, plánování i ekonomie.

### POTENCIÁLNÍ UŽIVATELÉ

Spolupráci a služby nabízíme vědecko-výzkumným institucím, firmám i jakýmkoli dalším organizacím.

### VÝHODY TECHNOLOGIE A VYUŽITÍ NA TRHU

Počítačové modelování je vhodné zejména v následujících případech:

1. Nahrazuje nákladné, nebezpečné, časově náročné, případně nerealizovatelné skutečné **experimenty**.
2. Umožňuje **detailní vhled do zkoumaných soustav**, který je často jinak nedostupný.
3. Umožňuje **zkoumat** zjednodušené či jinak upravené modely, čímž usnadňuje pochopení zkoumaných soustav.
4. Umožňuje **optimalizaci a automatizaci procesů**, a to zejména nahrazením a zefektivněním manuálních, semi-manuálních, či zastaralých algoritmických postupů v oblasti zpracování dat či rozhodovacích procesů, sofistikovanými algoritmy (typicky na bázi umělých neuronových sítí), bez kterých by zejména hlubší analýza a interpretace vysoko objemových dat byla téměř nemyslitelná.

High-performance computing, neboli **počítání pomocí velmi výkonného hardware**, umožňuje řádové urychlení výpočtů ve srovnání s jejich realizací na běžných počítačích.

Naše teoretické znalosti matematiky, fyziky a počítačových metod vytvářejí předpoklady pro dobré pochopení zkoumaných problémů, formulaci jejich matematických modelů a nalezení jejich optimálních řešení.



## DOPLŇUJÍCÍ INFORMACE

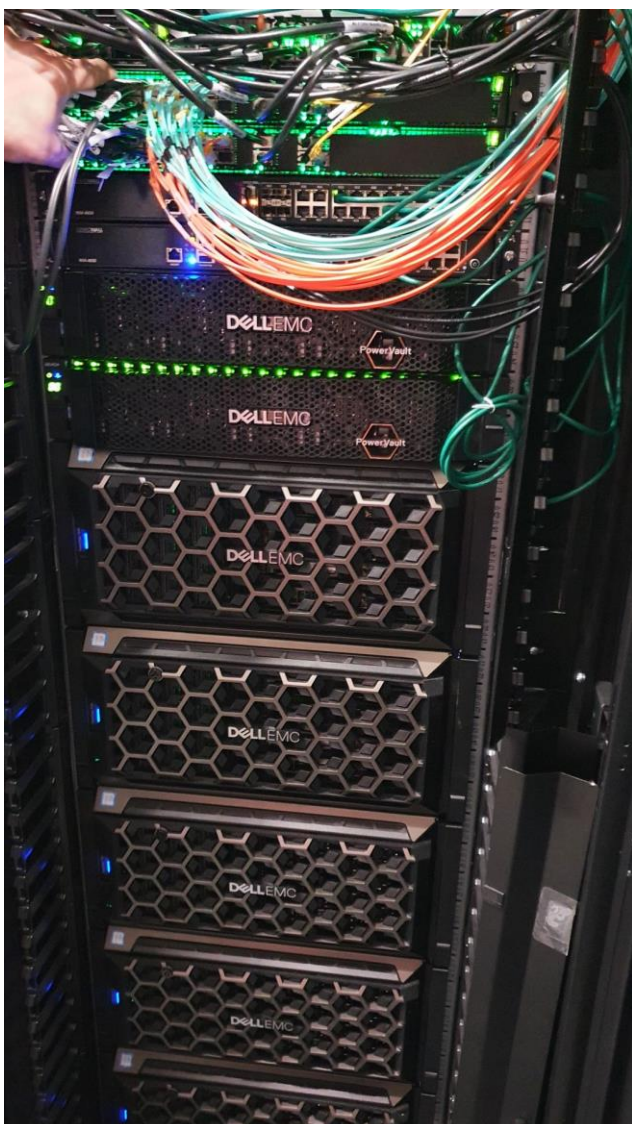
**Naše pracoviště může nabídnout komplexní službu zahrnující následující kroky:**

1. Teoretická analýza zadaného problému s použitím pokročilých metod matematiky a fyziky.
2. Formulace vhodných počítačových modelů zkoumaných soustav a dějů.
3. Implementace modelů a potřebných výpočetních metod pomocí efektivních výpočetních programů.
4. Realizace výpočtů pomocí výkonného hardware.
5. Analýza, diskuse a prezentace výsledků.

**Naše pracoviště disponuje odborníky na počítačové metody, a to zejména v těchto oblastech:**

1. **Částicové modelování** (molekulární simulace – Monte Carlo, Molekulární dynamika).
2. **Spojité modelování přenosu tepla a hmoty** (hydrodynamika, computational fluid dynamics).
3. **Optimalizace** (deterministické a stochastické metody s důrazem na evoluční algoritmy).
4. **Komplexní zpracování dat** - klasifikace, rekonstrukce, aproximace, extrapolace, transformace související s realizací autonomních rozhodovacích funkcí atd.
5. **Zpracování signálu a obrazu** (filtrace, frekvenční analýzy, detekce objektů a následné analýzy vyšší úrovně, včetně využití nejmodernějších technik na bázi umělých neuronových sítí).
6. **Simulace a analýzy komplexních dynamických systémů.**
7. **Paralelní programování a efektivní využití výkonných hybridních (CPU/GPU) výpočetních klastrů.**

Naše pracoviště disponuje výkonným moderním výpočetním klastrem (superpočítačem), který zahrnuje stovky výpočetních jader CPU Intel Xeon Gold 6240 a desítky GPU Nvidia RTX2080 Ti.



Výpočetní klastř Přírodovědecké fakulty UJEP - fotografie ze serverovny.