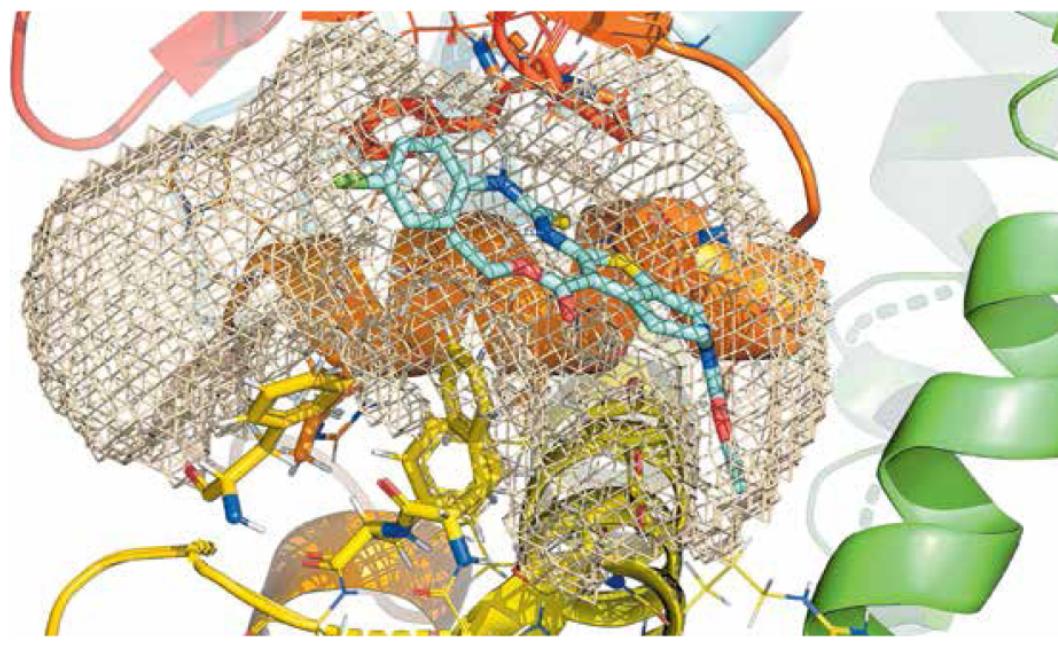


CENTAR ZA NAPREDNO RAČUNANJE I MODELIRANJE SA SUPERRAČUNALnim RESURSOM BURA INTENZIVIRA ZNANSTVENA ISTRAŽIVANJA

# Epicentar znanstvenika u borbi protiv klimatskih promjena i virusa

**Znanstveno-razvojni centar Sveučilišta u Rijeci, Centar za napredno računanje i modeliranje (CNRM), usmjerio je svoje aktivnosti prema razvoju i implementaciji sustava u superračunalnom okruženju, a Bura danas predstavlja centralni superračunalni resurs u Hrvatskoj. CNRM surađuje s brojnim domaćim i stranim znanstvenim institucijama i gospodarskim subjektima, pružajući im resurse i podršku pri realizaciji složenih proračuna u HPC okruženju**



Vezno mjesto inhibitora DNA metiltransferaze DNMT1 koji regulira proces specijalizacije matičnih stanica

Tanja ČORAK

**C**entar za napredno računanje i modeliranje (CNRM) ime je znanstveno-razvojnog centra Sveučilišta u Rijeci, ali i superračunala, poznatijeg pod nazivom Bura. CNRM-om upravlja više od 5 profesora: prof. Vanja Travaš, dr. Vedran Miletić, prof. Zoran Čarija, prof. Saša Mićanović, pod vodstvom prof. Lada Kranjčevića. Aktivnosti CNRM-a usmjerene su razvoju i implementaciji sustava u superračunalnom okruženju, a Bura danas predstavlja centralni superračunalni resurs u Hrvatskoj, dok napori CNRM tima, gledano kroz prizmu njihovog ukupnog rada - fokusirani su na intenziviranje znanstvenih istraživanja, posebno kroz konkretnu suradnju sa svim najvećim domaćim STEM institucijama i velikim europskim tehničkim sveučilištima i sveučilištima u našem okružju, kao što su Technical University of Denmark (DTU) - Kopenhagen, Technische Universität München (TUM), Università di Trieste, Uni Ljubljana, a koja je višestruk povećana u protekloj godini. Sasvim je jasno da danas bez odgovarajuće suvremene i jake tehnološki razvijene infrastrukture u kombinaciji s vrhunskim znanstvenicima - nije moguće ozbiljno i brzo odgovoriti na izazovne situacije - a to ovaj Centar ima.

Centar daje i Odjel za napredno modeliranje koji primjenom modernih metoda i tehnologija ostvaruje vezu između računalnih 3D modela i okoline.

CNRM surađuje s brojnim domaćim i stranim znanstvenim institucijama i gospodarskim subjektima, pružajući im resurse i podršku pri realizaciji složenih proračuna u HPC okruženju. Ovakav način rada omogućen je kroz strukturirano upravljanje u kojem se znaju ciljevi, a imaju uporiste u institucijskim dokumentima i strategiji, što je rektorka prof. dr. Snježana Prijic Samaržija prepozna koncipiravši u startu u glavne strateške ciljeve Sveučilišta i onaj o pametnoj specijalizaciji tj. povezivanju znanstvenih istraživanja s gospodarstvom i zajednicom. Rezultati odabranog smjera razvoja Sveučilišta u Rijeci kroz rad znanstveno-istraživačkih centara prepozna nastojanja u radu i korist koju omogućuju cijeloj hrvatskoj znanstvenoj zajednici te MZO sa Sveučilištem osigura dugoročnu održivost ovog visokotehnološkog sustava.

Vidljivo je, slaju se u Centru za napredno računanje i modeliranje, da je računalstvo i učinkovita digitalizacija društva nešto što nasi u ovakvo teškoj situaciji čini jačima, fleksibilnima i organiziranim - od školstva i fakulteta, državne uprave do trgovine, komunikacije i usluga, koje se u većoj mjeri mogu gotovo nesmetano odvijati zahvaljujući digitalnom i umreženom društvu.

- Misija CNRM-a je upravo omogućiti korištenje superračunalnih resursa mladim i inovativnim znanstvenim skupinama - prevladavajući administrativne

prepreke jer su često mladim znanstvenicima zatvorena vrata prema skupim superračunalnim resursima, navodi Lado Kranjčević dalje.

## Borba protiv virusa

U osvet pojave pandemije COVID-19, CNRM se povezao s Institutom »Ruder Bošković« iz Zagreba na zajedničkim radu u borbi protiv virusa, stavljaći na raspolaganje dostupne superračunalne resurse svim istraživačima koji rade na SARS-CoV-2 i provode istraživanja vezana uz pandemiju COVID-19. Ravnatelj IRB-a David Smith u tom kontekstu ističe kako je na »Ruderu« formirana veća grupa znanstvenika, zapravo zajednica, koja intenzivno koristi resurse superračunala Bura. Suradnja u formalnom smislu traje oko godinu dana, a u međuvremenu otvorila je prostor i za druge vidove suradnja znanstvenika s UNIRI i »Ruderom« za kojom stvarnost diktira potrebu. Osimljenja je i posebna povlašena privatna procedura te rezervirani besplatni resursi za znanstvenike organizirane u prevladavanju pandemije COVID-19, gdje oni mogu nesmetano provoditi simulacije, ne samo s područja biotehnologije i medicine, nego računati i modeli iz ekonomije te modele predviđanja širenja i dinamike pandemije bazirane na statističkim metodama i modelima umjetne inteligencije. Sustav je osmišljen s prof. Karoljom Skalom i dr. Davorom Davidovićem te dr. Draškom Tomićem s »Ruderom Boškovića«.

Prof. Karolj Skala tumači da u pokušajima susbijanja pandemije COVID-19 znanstvenici s Institutom »Ruder Bošković« u suradnji s kolegama iz inozemstva, koriste superračunalne resurse Bure kako bi brzo mogli izračunati koje kombinacije postojećih antivirálnih lijekova bi se moglo učinkovito koristiti za liječenje COVID-19 infekcije. Centar za informatiku i računarstvo IRB-a u suradnji sa Zavodom za narodno zdravlje »Dr. Andrija Štampar« započeo je suradnju na programu koji će se uputiti na poseban natječaj Hrvatske zaklade za znanost u vezano za COVID-19 u kojem se takođe predviđa korištenje superračunala Centra za napredno računanje Bura. Iz uvida u EU HPC ekosustav može se zaključiti, kaže Skala, da su skoro svih superračunalnih centri, PRACE partneri, udružili svoje infrastrukturne resurse u pokretanju COVID-19 projekata unutar »EXCALATE platform« i drugih projektnih inicijativa, s ciljem pronaalaženja lijeka za COVID-19. Krajem ožujka EU sa 48,5 milijuna eura prihvatio je finansiranje 18 projekata vezanih uz COVID-19, a svi projekti koriste europsku HPC računalnu infrastrukturu, dok se kod nas u suradnji s Algebrom aktualizira ideja uspostavljanja HPC akademije na nacionalnoj razini.

Ciljima tima CNRM-a jest da i Ministarstvo znanosti i obrazovanja prepozna nastojanja u radu i korist koju omogućuju cijeloj hrvatskoj znanstvenoj zajednici te MZO sa Sveučilištem osigura dugoročnu održivost ovog visokotehnološkog sustava.

Vidljivo je, slaju se u Centru za napredno računanje i modeliranje, da je računalstvo i učinkovita digitalizacija društva nešto što nasi u ovakvo teškoj situaciji čini jačima, fleksibilnima i organiziranim - od školstva i fakulteta, državne uprave do trgovine, komunikacije i usluga, koje se u većoj mjeri mogu gotovo nesmetano odvijati zahvaljujući digitalnom i umreženom društву.

- Misija CNRM-a je upravo omogućiti korištenje superračunalnih resursa mladim i inovativnim znanstvenim skupinama - prevladavajući administrativne

dobiva i strukturu kroz partnerstvo na zajedničkim evropskim projektima. Oni nose razmjenu znanja, brojnih znanstvenika i studenata koji od Rijeke čine kozmopolitski grad ucrtan na evropskoj znanstvenoj karti. Dio resursa koristi se za komercijalnu namjenu u suradnji s visokotehnološkim poduzećima iz Hrvatske i inozemstva. Duže partnerstvo odvija se s HYDROTEC gmbh Njemačka u suradnji s dr. Marinkom Nujićem, i to na razvoju modernog simulacijskog softvera na području analize strujanja otvorenih vodotoka. Zanimljiva je i suradnja s Altair Hyperworks, jednom od vodećih svjetskih tvrtki inženjerskog softvera.

Upotreba preciznih uređaja za 3D industrijsko mjeriteljstvo takođe je dio CNRM-a. Prof. Goran Turkalj i prof. Domagoj Lanc rade statička ispitivanja printanih kompozitnih uzoraka i određivanje polja pomača i deformacija pri čemu koriste sustav ARAMIS; prof. Robert Basan pak koristi ARAMIS sustav u dinamičkoj analizi. Prof. Duško Pavletić i asistentica Maja Marković vode predavanja i laboratorijsku nastavu studentima Riteha na visokospecijaliziranim mjernim uređajima (ATOS), a prof. Marina Franulović sa svojom istraživačkom skupinom u istraživanju koristi GOM sofisticirane mjerne uređaje CNRM-a.

Aktivni istraživači na Buri su i prof. dr. Lado Kranjčević, izv. prof. Siniša Družeta, Luka Grbčić, Ante Sikirica, Ivana Lučin, doc. Stefan Ivić i izv. prof. Jerko Škifić i to, za javnost u vrlo važnom u istraživačkom pravcu kompleksnih numeričkih modela strujanja u okolišu, koji uključuju modeliranje strujanja u rijeckama, moru i atmosferi uz simulaciju širenja onečišćenja; primjenjuju inovativne optimizacijske metode, umjetne inteligencije i strojnjog učenja u modelima mijenjanja i predikciji mikrobiološkog onečišćenja u moru.

## Analiza onečišćenja voda

Upravo prof. Daria Vukić Lušić, znanstvenica s MEDRI, radi na analizi mikrobiološkog onečišćenja voda - posebno mora, koristeći u znanstvenim istraživanjima sofisticirane, nove metode laboratorijskih analiza i modele predikcije mikrobiološkog onečišćenja bazirane na strojnom učenju. Prof. Zoran Čarija s RITEH-a istražuje analize strujanja i optimizaciju toka fluida, uz rad na simulaciji strujanja fluida oko brodskih formi i offshore struktura. Novi članovi CNRM-a mladi su docenti Daniela Kalafatović s Odjela za biotehnologiju i Goran Mauša s Tehničkog fakulteta, koji sudjeluju u znanstveno-istraživačkim projektima Klimod i DeShPet. U projektu Klimod, planirana je analiza koncentracija mikroplastika u moru te izgradnja modela predviđanja zagadenja našeg priobalja zasnovanog na tehnikama strojnog učenja. Projekt akronima DeShPet pod vodstvom Daniele Kalafatović, interdisciplinarni je projekt za dizajn katalitički aktivnih peptida i peptidi nanostrukura koji povezuje riječki tim sa znanstvenicima Sveučilišta NOVA iz Lisabona, odnosno polja kemije peptida i računarstva. Upravo računalni dio projekta temelji se na primjeni metoda umjetne inteligencije za koji

## Projekti s EOS Inovacijama

Izuzetno plodna suradnja između ekipa prof. Kranjčevića odvija se i s konzultantskim tvrtkom EOS Inovacije pod vodstvom Kristine Jurić, koja je rezultirala i nizom prijava na evropske projektnе natječaje. Izdvajamo najznačajnije:

\*KLIMOD: u ožujku je krenuo znanstveno-istraživački EU projekt »Računalni model strujanja, poplavljivanja i širenja onečišćenja u rijeckama i obalnim morskim područjima (KLIMOD)« unutar natječaja »Shema za jačenje primjenjivih istraživanja za mjere prilagodobe klimatskim promjenama«. CNRM je voditelj prestižnog konzorcija vodećih hrvatskih znanstvenih institucija, a tema projekta su aktualne i odnose se na numeričke modele u okolini, uz primjenu modela umjetne inteligencije na širenje anorganskog i mikrobiološkog onečišćenja i problema onečišćenja mikroplastikom.

Vrijednost projekta je 2,8 milijuna kuna. Prijavio ga je Tehnički fakultet Rijeke (voditelj Lado Kranjčević). Partneri su PMF - Geološki odsjek, Zagreb, Institut Ruder Bošković, Zagreb, Medicinski fakultet Rijeke, Vanjski konzultanti i pratitelj tijekom prijave i provedbe je EOS Inovacije d.o.o. Rijeka.

\*EUROCC - National Competence Centres in the framework of EuRoHPC (EUROCC). U okviru ovog velikog EU projekta, vrijednosti 52 milijuna eura je UNIRI-CNMR uključen zajedno s partnerskom institucijom SRCE Zagreb. Voditelj hrvatske komponente je Ivan Marić iz SRCE Zagreb, dok je voditelj cijelog projekta Uni Stuttgart i njihov superračunalni centar HLRS - vodeća superračunalna institucija u Europi.

Bura je stoga uključena u mrežu 34 najvećih evropskih superračunalnih institucija i 31 zemlji.

\*HPC4YOU s partnerima - prijavitelji i voditelj je CNRM, partneri su Università di Trieste, Technische Universität München (TUM), Technical University of Denmark (DTU) - Copenhagen. U okviru ovog prestižnog konzorcija koji uključuje neke od najvećih kontinentalnih evropskih tehničkih sveučilišta, osim znanstvenika iz Hrvatske, Italije, Danske i Njemačke, sudjeluju i znanstvenici iz Kine i Japana s ciljem primjene superračunalnih resursa na numeričke simulacije računalne dinamike fluida, biotehnologije, genetike, računalstva, astrofizike uz istovremenu primjenu metoda umjetne inteligencije na to specijaliziranim radnim stanicama za umjetnu inteligenciju koji se upravo nabavljaju na Sveučilištu u Rijeci.



Riječki znanstvenici ispred Bure s kolegama iz UNITrieste

Odjela za informatiku. Aktivno koriste u svrhu simulacija molekularne dinamike i kemijskih reakcija opisanih pomoću kvantne fizike te predviđanja pristajanja lijekova. Na Buri su dosad dizajnirali visokospecifične inhibitory DNA metilacije koji imaju primjenu u regeneraciji tkiva genetičkim reprogramiranjem stanica. Takvi inhibitori se prodaju na tržištu po cijeni od nekoliko tisuća dolara za gram, što je dva reda većine skupljje od zlata. Pored toga, suraduju sa švedskom akademkinjom Astrid Gräslund na izučavanju agregacija proteinâ u procesu nastajanja Alzheimerove bolesti za koje simulacije takođe izvode na Buri, a nedavno su u suradnji s dr. Annom Sablonim s Flamanskog instituta za biotehnologiju u Belgiji počeli raditi i visokoprotročne preglede molekula koje mogu služiti u procesu regulacije RAS proteina, čija preterana aktivnost utječe na nastanak karcinoma.

Još jedna znanstveno izuzetno kvalitetna skupina astrofizičara, koja je aktivna na superračunalu Bura, jest skupina pod vodstvom poznate astrofizičarke prof. dr. Diana Prester Dominis i prof. Saše Mićanovića. Zanimljiva je i suradnja s Udrženjem pčelaških udrug PGŽ-a i prof. dr. Draženom Lušićem, koji provode sofisticirani projekt analize mednog prinosâ, baziran na visokoj tehnologiji te predikciji prinosâ meda za koje su opet nužni superračunalni resursi Bure. Na području računarstva na superračunalu Bura su aktivni i profesori s Tehničkog fakulteta doc. Jonatan Lerga, prof. Sandi Ljubić, prof. Ivan Stajduhar i asistent Diego Sušan. Ovako opsežne aktivnosti jedva je moguće provesti i za njih su izuzetno zaslužni doktorand Gordan Janeš i doktorand Ante Sikirica, kao specijalisti na Buri.

- Oni čine čuda svojom aktivnošću i naporima da usklade sve proračunske aktivnosti mnogobrojnih istraživača i još se stignu baviti vlastitim znanstvenim istraživanjima, zaključuju voditelj CNRM-a Lado Kranjčević, koji neprekidno naglašava da je tim taj koji je zaslužan i stoji iza CNRM-a.