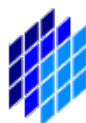


Výpočtové stredisko SAV



**Správa o činnosti organizácie SAV
za rok 2016**

Bratislava
január 2017

Obsah osnovy Správy o činnosti organizácie SAV za rok 2016

1. Základné údaje o organizácii
2. Vedecká činnosť
3. Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku
4. Medzinárodná vedecká spolupráca
5. Vedná politika
6. Spolupráca s VŠ a inými subjektmi v oblasti vedy a techniky
7. Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou
8. Aktivity pre Národnú radu SR, vládu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné organizácie
9. Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity
10. Činnosť knižnično-informačného pracoviska
11. Aktivity v orgánoch SAV
12. Hospodárenie organizácie
13. Nadácie a fondy pri organizácii SAV
14. Iné významné činnosti organizácie SAV
15. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie SAV
16. Poskytovanie informácií v súlade so zákonom o slobodnom prístupe k informáciám
17. Problémy a podnety pre činnosť SAV

PRÍLOHY

- A Zoznam zamestnancov a doktorandov organizácie k 31.12.2016*
- B Projekty riešené v organizácii*
- C Publikáčná činnosť organizácie*
- D Údaje o pedagogickej činnosti organizácie*
- E Medzinárodná mobilita organizácie*

1. Základné údaje o organizácii

1.1. Kontaktné údaje

Názov: Výpočtové stredisko SAV

Riaditeľ: Ing. Michal Kadúč

Zástupca riaditeľa: Mgr. Lukáš Demovič, PhD.

Vedecký tajomník: neuvedený

Predseda vedeckej rady: neuvedený

Člen snemu SAV: Ing. Michal Kadúč

Adresa: Dúbravská cesta 9, 845 35 Bratislava

<http://www.vs.sav.sk>

Tel.: 02/ 3229 3111

Fax: 02/ 3229 3103

E-mail: Stefania.Mucickova@savba.sk

Názvy a adresy detašovaných pracovísk:

- **Výpočtové stredisko SAV, Žilina**
Univerzitná 3833, 010 01 Žilina

Vedúci detašovaných pracovísk:

- **Výpočtové stredisko SAV, Žilina**
Ing. Michal Kadúč

Typ organizácie: Príspevková od roku 2007

1.2. Údaje o zamestnancoch

Tabuľka 1a Počet a štruktúra zamestnancov

Štruktúra zamestnancov	K	K		K do 35 rokov		F	P	T
		M	Ž	M	Ž			
Celkový počet zamestnancov	32	22	10	7	4	32	26,31	4,24
Vedeckí pracovníci	6	6	0	2	0	6	3,64	3,32
Odborní pracovníci VŠ (výskumní a vývojoví zamestnanci ¹)	0	0	0	0	0	0	0	0
Odborní pracovníci VŠ (ostatní zamestnanci ²)	18	12	6	4	4	18	16,68	0,92
Odborní pracovníci ÚS	6	4	2	1	0	6	5,35	0
Ostatní pracovníci	2	0	2	0	0	2	0,64	0

¹ odmeňovaní podľa 553/2003 Z.z., príloha č. 5

² odmeňovaní podľa 553/2003 Z.z., príloha č. 3 a č. 4

K – kmeňový stav zamestnancov v pracovnom pomere k 31.12.2016 (uvádzať zamestnancov v pracovnom pomere, vrátane riadnej materskej dovolenky, zamestnancov pôsobiacich v zahraničí, v štátnych funkciách, členov

Predsedníctva SAV, zamestnancov pôsobiacich v zastupiteľských zboroch)

F – fyzický stav zamestnancov k 31.12.2016 (bez riadnej materskej dovolenky, zamestnancov pôsobiacich v zahraničí v štátnych funkciách, členov Predsedníctva SAV, zamestnancov pôsobiacich v zastupiteľských zboroch)

P – celoročný priemerný prepočítaný počet zamestnancov

T – celoročný priemerný prepočítaný počet riešiteľov projektov

M, Ž – muži, ženy

Tabuľka 1b Štruktúra vedeckých pracovníkov (kmeňový stav k 31.12.2016)

Rodová skladba	Pracovníci s hodnosťou				Vedeckí pracovníci v stupňoch		
	DrSc.	CSc./PhD.	prof.	doc.	I.	II.a.	II.b.
Muži	2	7	2	1	2	1	3
Ženy	0	0	0	0	0	0	0

Tabuľka 1c Štruktúra pracovníkov podľa veku a rodu, ktorí sú riešiteľmi projektov

Veková štruktúra (roky)	< 31	31-35	36-40	41-45	46-50	51-55	56-60	61-65	> 65
Muži	1	1	2	0	0	0	0	1	0
Ženy	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabuľka 1d Priemerný vek zamestnancov organizácie k 31.12.2016

	Kmeňoví zamestnanci		Vedeckí pracovníci		Riešitelia projektov	
	Bez úväzku	S úväzkom	Bez úväzku	S úväzkom	Bez úväzku	S úväzkom
Muži	46,9	36,3	47,5	24,5	39,4	23,8
Ženy	43,1	30,9	0,0	0,0	0,0	0,0
Spolu	45,7	34,6	47,5	24,5	39,4	23,8

1.3. Iné dôležité informácie k základným údajom o organizácii a zmeny za posledné obdobie (v zameraní, v organizačnej štruktúre a pod.)

2. Vedecká činnosť

2.1. Domáce projekty

Tabuľka 2a Počet domácich projektov riešených v roku 2016

ŠTRUKTÚRA PROJEKTOV	Počet projektov		Čerpané financie za rok 2016 (v €)		
	A	B	A		B
			spolu	pre organizáciu	
1. Vedecké projekty, ktoré boli r. 2016 financované VEGA	0	1	-	-	5514
2. Projekty, ktoré boli r. 2016 financované APVV	0	0	-	-	-
3. Projekty OP ŠF	2	0	268489	44121	-
4. Projekty centier excelentnosti SAV	0	0	-	-	-
5. Iné projekty (FM EHP, ŠPVV, Vedecko-technické projekty, ESF, na objednávku rezortov a pod.)	3	1	23000	23000	-

A - organizácia je nositeľom projektu

B - organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu

Tabuľka 2b Zoznam domácich projektov podaných v roku 2016

Štruktúra projektov	Miesto podania	Organizácia je nositeľom projektu	Organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu
1. Účasť na nových výzvach APVV r. 2016	-		
2. Projekty výziev OP ŠF podané r. 2016	Bratislava		
	Regióny		

2.2. Medzinárodné projekty

2.2.1. Medzinárodné projekty riešené v roku 2016

Tabuľka 2c Zoznam medzinárodných projektov riešených v roku 2016

ŠTRUKTÚRA PROJEKTOV	Počet projektov		Čerpané financie za rok 2016 (v €)		
	A	B	A		B
			spolu	pre organizáciu	
1. Projekty 7. Rámcového programu EÚ a Horizont 2020	0	1	-	-	96774
2. Multilaterálne projekty v rámci vedeckých programov COST, ERANET, INTAS, EUREKA, ESPRIT, PHARE, NATO, UNESCO, CERN, IAEA, ESF (European Science Foundation), ERDF a iné	0	0	-	-	-
3. Projekty v rámci medzivládnych dohôd o vedecko-technickej spolupráci	0	0	-	-	-
4. Bilaterálne projekty	0	0	-	-	-
5. Podpora medzinárodnej spolupráce z národných zdrojov (MVTs, APVV,...)	0	0	-	-	-
6. Iné projekty financované alebo spolufinancované zo zahraničných zdrojov	0	0	-	-	-

A - organizácia je nositeľom projektu

B - organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu

2.2.2. Medzinárodné projekty v 7. RP EÚ a Horizont 2020 podané v roku 2016

Tabuľka 2d Počet projektov 7. RP EÚ a Horizont 2020 v roku 2016

	A	B
Počet podaných projektov v 7. RP EÚ		
Počet podaných projektov Horizont 2020		1

A - organizácia je nositeľom projektu

B - organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu

Údaje k domácim a medzinárodným projektom sú uvedené v Prílohe B.

2.2.3. Zámery na čerpanie štrukturálnych fondov EÚ v ďalších výzvach

2.3. Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce (maximálne 1000 znakov + 1 obrázok)

2.3.1. Základný výskum

2.3.2. Aplikačný typ

2.3.3. Medzinárodné vedecké projekty

2.4. Publikačná činnosť (zoznam je uvedený v prílohe C)

Tabuľka 2e Štatistika vybraných kategórií publikácií

PUBLIKAČNÁ A EDIČNÁ ČINNOSŤ	A Počet v r. 2016/ doplňky z r. 2015	B Počet v r. 2016/ doplňky z r. 2015	C Počet v r. 2016/ doplňky z r. 2015
1. Vedecké monografie a monografické štúdie vydané v domácich vydavateľstvách (AAB, ABB)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
2. Vedecké monografie a monografické štúdie vydané v zahraničných vydavateľstvách (AAA, ABA)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
3. Odborné monografie, vysokoškolské učebnice a učebné texty vydané v domácich vydavateľstvách (BAB, ACB, CAB)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
4. Odborné monografie a vysokoškolské učebnice a učebné texty vydané v zahraničných vydavateľstvách (BAA, ACA, CAA)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
5. Kapitoly vo vedeckých monografiách vydaných v domácich vydavateľstvách (ABD)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
6. Kapitoly vo vedeckých monografiách vydaných v zahraničných vydavateľstvách (ABC)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
7. Kapitoly v odborných monografiách, vysokoškolských učebniciach a učebných textoch vydaných v domácich vydavateľstvách (BBB, ACD)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
8. Kapitoly v odborných monografiách, vysokoškolských učebniciach a učebných textoch vydaných v zahraničných vydavateľstvách (BBA, ACC)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
9. Vedecké práce registrované v Current Contents Connect (ADCA, ADCB, ADDA, ADDB)	4 / 0	0 / 0	0 / 0
10. Vedecké práce registrované vo Web of Science Core Collection alebo Scopus (ADMA, ADMB, ADNA, ADNB)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
11. Vedecké práce v ostatných domácich časopisoch (ADFA, ADFB)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
12. Vedecké práce v ostatných zahraničných časopisoch (ADEA, ADEB)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
13. Vedecké práce v domácich recenzovaných zborníkoch (AEDA)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
14. Vedecké práce v zahraničných recenzovaných zborníkoch	0 / 0	0 / 0	0 / 0

(AECA)			
15. Publikované príspevky na domácich vedeckých konferenciách (AFB, AFD)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
16. Publikované príspevky na zahraničných vedeckých konferenciách (AFA, AFC)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
17. Vydané periodiká evidované v CCC, WoS Core Collection, SCOPUS	0	0	0
18. Ostatné vydané periodiká	0	0	0
19. Vydané alebo editované zborníky z vedeckých podujatí (FAI)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
20. Preklady vedeckých a odborných textov (EAJ)	0 / 0	0 / 0	0 / 0
21. Heslá v odborných terminologických slovníkoch a encyklopédiách (BDA, BDB)	0 / 0	0 / 0	0 / 0

A - pracovisko SAV je uvedené ako pracovisko (adresa) autora, alebo je súčasťou kolaborácie alebo iného združenia, ktoré je uvedené ako pracovisko (adresa) autora

B - pracovisko SAV nie je na publikácii uvedené, pretože prameň údaj o pracovisku autora neobsahuje, práca ale vznikla na pracovisku SAV

C - pracovisko SAV je uvedené ako materské pracovisko autora odlišné od pracoviska, na ktorom práca vznikla (napr. „on leave...“, „permanent address...“, „present address...“)

Tabuľka 2f Štatistika vedeckých prác podľa kvartilu vedeckého časopisu

Kvartil vedeckého časopisu podľa IF z r. 2015 (zdroj JCR)	Q1	Q2	Q3	Q4	spolu
<i>Počet článkov / doplnky</i>	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
Kvartil vedeckého časopisu podľa SJR z r. 2015 (zdroj Scimago)					
<i>Počet článkov</i>	0	0	0	0	0

Tabuľka 2g Ohlasy

OHLASY	A Počet v r. 2015/ doplňky z r. 2014	B Počet v r. 2015/ doplňky z r. 2014
Citácie vo WOS (1.1, 2.1)	37 / 0	0 / 0
Citácie v SCOPUS (1.2, 2.2)	0 / 0	0 / 0
Citácie v iných citačných indexoch a databázach (9, 10, 3.2, 4.2)	0 / 0	0 / 0
Citácie v publikáciách neregistrovaných v citačných indexoch (3, 4, 3.1, 4.1)	0 / 0	0 / 0
Recenzie na práce autorov z organizácie (5, 6, 7, 8)	0 / 0	0 / 0

A - pracovisko SAV je uvedené ako pracovisko (adresa) autora, alebo je súčasťou kolaborácie alebo iného združenia, ktoré je uvedené ako pracovisko (adresa) autora, alebo pracovisko SAV nie je na publikácii uvedené, pretože prameň údaj o pracovisku autora neobsahuje, práca ale vznikla na pracovisku SAV

B - pracovisko SAV je uvedené ako materské pracovisko autora odlišné od pracoviska, na ktorom práca vznikla (napr. „on leave...“, „permanent address...“, „present address...“)

2.5. Aktívna účasť na vedeckých podujatiach

Tabuľka 2h Vedecké podujatia

Prednášky a vývesky na medzinárodných vedeckých podujatiach	
Prednášky a vývesky na domácich vedeckých podujatiach	

2.6. Vyžiadané prednášky**2.6.1. Vyžiadané prednášky na medzinárodných vedeckých podujatiach****2.6.2. Vyžiadané prednášky na domácich vedeckých podujatiach****2.6.3. Vyžiadané prednášky na významných vedeckých inštitúciách**

Ak boli príspevky publikované, sú súčasťou prílohy C, kategória (AFC, AFD, AFE, AFF, AFG, AFH)

2.7. Patentová a licenčná činnosť na Slovensku a v zahraničí v roku 2016**2.7.1. Vynálezy, na ktoré bol udelený patent****2.7.2. Prihlásené vynálezy****2.7.3. Predané licencie****2.7.4. Realizované patenty**

Finančný prínos pre organizáciu SAV v roku 2016 a súčet za predošlé roky sa neuvádzajú, ak je zverejnenie v rozpore so zmluvou súvisiacou s realizáciou patentu.

2.8. Účasť expertov na hodnotení národných projektov (APVV, VEGA a iných)

Tabuľka 2i Experti hodnotiaci národné projekty

Meno pracovníka	Typ programu/projektu/výzvy	Počet hodnotených projektov
------------------------	------------------------------------	------------------------------------

Noga Jozef	APVV	1
	VEGA	1

2.9. Účasť na spracovaní hesiel do encyklopédie Beliana

Počet autorov hesiel: 0

2.10. Iné informácie k vedeckej činnosti.

3. Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku

3.1. Údaje o doktorandskom štúdiu

Tabuľka 3a Počet doktorandov v roku 2016

Forma	Počet k 31.12.2016				Počet ukončených doktorantúr v r. 2016					
	Doktorandi				Ukončenie z dôvodov					
	celkový počet		z toho novoprijatí		ukončenie úspešnou obhajobou		predčasné ukončenie		neúspešné ukončenie	
	M	Ž	M	Ž	M	Ž	M	Ž	M	Ž
Interná zo zdrojov SAV	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Interná z iných zdrojov	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Externá	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Spolu	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Súhrn	0		0		0		0		0	

3.2. Zmena formy doktorandského štúdia

Tabuľka 3b Počty preradení z interných foriem na externé a z externej formy na interné

Pôvodná forma	Interná z prostriedkov SAV	Interná z prostriedkov SAV	Interná z iných zdrojov	Interná z iných zdrojov	Externá	Externá
Nová forma	Interná z iných zdrojov	Externá	Interná z prostriedkov SAV	Externá	Interná z prostriedkov SAV	Interná z iných zdrojov
Počet	0	0	0	0	0	0

3.3. Zoznam doktorandov, ktorí ukončili doktorandské štúdium úspešnou obhajobou

Tabuľka 3c Menný zoznam ukončených doktorandov v roku 2016 úspešnou obhajobou

Meno doktoranda	Forma DŠ	Mesiac, rok nástupu na DŠ	Mesiac, rok obhajoby	Číslo a názov študijného odboru	Meno a organizácia školiteľa	Fakulta udeľujúca vedeckú hodnosť
-----------------	----------	---------------------------	----------------------	---------------------------------	------------------------------	-----------------------------------

Zoznam interných a externých doktorandov je uvedený v prílohe A.

3.4. Zoznam akreditovaných študijných odborov s uvedením VŠ

Tabuľka 3d Zoznam akreditovaných študijných odborov s uvedením univerzity/vysokej školy a fakulty, kde sa doktorandský študijný program uskutočňuje

Názov študijného odboru (ŠO)	Číslo ŠO	Doktorandské štúdium uskutočňované na (univerzita/vysoká škola a fakulta)
------------------------------	----------	--

Tabuľka 3e Účasť na pedagogickom procese

Menný prehľad pracovníkov, ktorí boli menovaní do spoločných odborových komisií pre doktorandské štúdium	Menný prehľad pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia vedeckých rád univerzít, správnych rád univerzít a fakúlt	Menný prehľad pracovníkov, ktorí získali vyššiu vedeckú, pedagogickú hodnotu alebo vyšší kvalifikačný stupeň
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (chemická fyzika)	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (Fakulta prírodných vied UMB)	
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (anorganická chémia)	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (Prírodovedecká fakulta UK)	

3.5. Údaje o pedagogickej činnosti

Tabuľka 3f Prednášky a cvičenia vedené v roku 2016

PEDAGOGICKÁ ČINNOSŤ	Prednášky		Cvičenia a semináre	
	doma	v zahraničí	doma	v zahraničí
Počet prednášateľov alebo vedúcich cvičení	1	0	0	0
Celkový počet hodín v r. 2016	48	0	0	0

Prehľad prednášateľov predmetov a vedúcich cvičení, s uvedením názvu predmetu, úväzku, katedry, fakulty, univerzity/vysokej školy je uvedený v prílohe D.

Tabuľka 3g Aktivity pracovníkov na VŠ

1.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako vedúci alebo konzultanti diplomových a bakalárskych prác	0
2.	Počet vedených alebo konzultovaných diplomových a bakalárskych prác	0
3.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako školitelia doktorandov (PhD.)	0
4.	Počet školených doktorandov (aj pre iné inštitúcie)	0
5.	Počet oponovaných dizertačných a habilitačných prác	0
6.	Počet pracovníkov, ktorí oponovali dizertačné a habilitačné práce	0
7.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií pre obhajoby DrSc. prác	0
8.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií pre obhajoby PhD. prác	1
9.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií, resp. oponenti v inauguračnom alebo habilitačnom konaní na vysokých školách	1

3.6. Iné dôležité informácie k pedagogickej činnosti

4. Medzinárodná vedecká spolupráca

4.1. Medzinárodné vedecké podujatia

4.1.1. Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré organizácia SAV organizovala v roku 2016 alebo sa na ich organizácii podieľala, s vyhodnotením vedeckého a spoločenského prínosu podujatia

4.1.2. Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré usporiada organizácia SAV v roku 2017 (anglický a slovenský názov podujatia, miesto a termín konania, meno, telefónne číslo a e-mail zodpovedného pracovníka)

4.1.3. Počet pracovníkov v programových a organizačných výboroch medzinárodných konferencií

Tabuľka 4a Programové a organizačné výbory medzinárodných konferencií

Typ výboru	Programový	Organizačný	Programový i organizačný
Počet členstiev	0	0	0

4.2. Členstvo a funkcie v medzinárodných orgánoch

4.2.1. Členstvo a funkcie v medzinárodných vedeckých spoločnostiach, úniách a národných komitétach SR

prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

International Academy for Quantum Molecular Sciences (funkcia: volené členstvo)

4.3. Účast' expertov na hodnotení medzinárodných projektov (EÚ RP, ESF a iných)

Tabuľka 4b Experti hodnotiaci medzinárodné projekty

Meno pracovníka	Typ programu/projektu/výzvy	Počet hodnotených projektov
Holka Filip	IT4I OPEN 7TH CALL	11
	IT4I OPEN 8TH CALL	5

4.4. Najvýznamnejšie prínosy MVTS ústavu vyplývajúce z mobility a riešenia medzinárodných projektov a iné informácie k medzinárodnej vedeckej spolupráci

*Prehľad údajov o medzinárodnej mobilite pracovníkov organizácie je uvedený v Prílohe E.
Prehľad a údaje o medzinárodných projektoch sú uvedené v kapitole 2 a Prílohe B.*

5. Vedná politika

6. Spolupráca s univerzitami/vysokými školami, štátnymi a neziskovými inštitúciami okrem aktivít uvedených v kap. 2, 3, 4

6.1. Spolupráca s univerzitami/VŠ (fakultami)

6.2. Významné aplikácie výsledkov výskumu v spoločenskej praxi alebo vyriešenie problému pre štátnu alebo neziskovú inštitúciu

6.3. Iná činnosť využiteľná pre potreby spoločenskej praxe

7. Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou okrem aktivít uvedených v kap. 2, 3, 4

7.1. Spoločné pracoviská s aplikačnou sférou

7.2. Kontraktový – zmluvný výskum (vrátane zahraničných kontraktov)

7.3. Iná činnosť využiteľná pre potreby hospodárskej praxe

8. Aktivity pre Národnú radu SR, vládu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné organizácie

8.1. Členstvo v poradných zboroch vlády SR, Národnej rady SR, ministerstiev SR, orgánoch EÚ, EP, NATO a pod.

Tabuľka 8a Členstvo v poradných zboroch Národnej rady SR, vlády SR, ministerstiev SR, orgánoch EÚ, EP, NATO a pod.

Meno pracovníka	Názov orgánu	Funkcia
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.	PRACE - the Partnership for Advanced Computing in Europe	Člen

8.2. Expertízna činnosť a iné služby pre štátnu správu a samosprávu

8.3. Členstvo v radách štátnych programov a podprogramov ŠPVV a ŠO

Tabuľka 8b Členstvo v radách štátnych programov a podprogramov ŠPVV a ŠO

Meno pracovníka	Názov orgánu	Funkcia
Ing. Tomáš Lacko	Riadiaca rada projektu SANET do škôl	člen
	Predstavenstvo SANET (Združenie používateľov Slovenskej akademickej dátovej siete SANET)	člen

8.4. Prehľad aktuálnych spoločenských problémov, ktoré riešilo pracovisko v spolupráci s Kanceláriou prezidenta SR, s vládnyimi a parlamentnými orgánmi alebo pre ich potrebu

9. Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity

9.1. Vedecko-popularizačná činnosť

9.1.1. Najvýznamnejšia vedecko-popularizačná činnosť pracovníkov organizácie SAV

Tabuľka 9a Vedecko-popularizačná činnosť pracovníkov organizácie SAV

Meno	Spoluautori	Typ ¹	Názov	Miesto zverejnenia	Dátum alebo počet za rok
Ing. Štefan Kohút		IN	60 rokov informatiky na Slovensku	www.vystava.sav.sk	28.9.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Bilingválne gymnázium C. S. Lewisa	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	19.4.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	EXTRAPOLÁCIE 2016	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	26.9.2016
Ing. Štefan Kohút		IN	Ivan Plander a 60 rokov informatiky na Slovensku	vedanadosah.cvtisr.sk	25.9.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Katedra základov a vyučovania informatiky FMFI UK	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	17.5.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Obchodná akadémia Nevädzová 1.A	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	13.4.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Obchodná akadémia Nevädzova 1.B	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	13.4.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Obchodná akadémia Nevädzova 1.C	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	13.4.2016
Ing. Štefan Kohút		PB	Počítačové laboratórium ÚTK SAV	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	20.10.2016
Ing. Štefan Kohút		PB	Probionika 4	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	18.9.2016
Ing. Štefan Kohút		TL	Problematika živej prezentácie starých počítačov	STM Košice	10.10.2016
Ing. Štefan Kohút		PB	Prokybernetika 8	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	19.6.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Slovenská informatická spoločnosť	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	9.3.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	SOŠ drevárska Topoľčany	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	14.6.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	SOŠ Ivanska cesta	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	21.4.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	SOŠ pre žiakov s TP Mokrohájska 1	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	27.4.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Spojená škola Tvrdošín	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	3.11.2016

Ing. Štefan Kohút		EX	UI ČAV	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	19.10.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	Výpočtové centrum FMFI UK	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	25.10.2016
Ing. Štefan Kohút		EX	ZŠ Kubranská Trenčín	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	5.4.2016
Ing. Štefan Kohút	doc. Ing. Martin Šperka, CSc.	PB	Prokybernetika 9	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	26.10.2016
Ing. Štefan Kohút	doc. Ing. Martin Šperka, CSc.	EX	Stredná priemyselná škola v Martine	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	18.10.2016
Ing. Štefan Kohút	Ing. Jana Bečková, Pavol Herda	PB	Sprístupnenie dokumentov histórie IT v Ústrednom archíve SAV	Filozofická fakulta UK	13.4.2016
Ing. Štefan Kohút	RNDr. Gabriela Obadalová	PU	25 rokov od založenia Združenia používateľov Slovenskej akademickej dátovej siete SANET	SANET	10.9.2016
Ing. Štefan Kohút	RNDr. Gabriela Obadalová	PU	25 Years since the Establishment of The Association of the Users of the Slovak Academic Data Network SANET	SANET	10.9.2016

¹ PB - prednáška/beseda, TL - tlač, TV - televízia, RO - rozhlas, IN - internet, EX - exkurzia, PU - publikácia, MM - multimédiá, DO - dokumentárny film

9.1.2. Súhrnné počty vedecko-popularizačných činností organizácie SAV

Tabuľka 9b Súhrnné počty vedecko-popularizačných činností organizácie SAV

Typ	Počet	Typ	Počet	Typ	Počet
prednášky/besedy	5	tlač	1	TV	0
rozhlas	0	internet	0	exkurzie	25
publikácie	2	multimediálne nosiče	0	dokumentárne filmy	0
iné	0				

9.2. Vedecko-organizačná činnosť

Tabuľka 9c Vedecko-organizačná činnosť

Názov podujatia	Domáca/ medzinárodná	Miesto	Dátum konania	Počet účastníkov
-----------------	-------------------------	--------	---------------	---------------------

9.3. Účasť na výstavách

Názov výstavy: Výstava historických počítačov

Miesto konania: BORY MALL

Dátum: 25.9.2016

Zhodnotenie účasti: Výstava poskytla návštevníkom OC BORY MALL pohľad na staré počítače z výroby na Slovensku v minulosti a propagovala projekt EXTRAPOLÁCIE2016 v Bratislave.

Názov výstavy: EXTRAPOLÁCIE 2016

Miesto konania: Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku

Dátum: 25.9.2016

Zhodnotenie účasti: Výstava bola vybavená novými informačnými tabuľkami tak aby priblížila návštevníkom vybrané exponáty a ich spojitosť so 60. výročím ÚTK SAV

9.4. Účast' v programových a organizačných výboroch národných konferencií

Tabuľka 9d Programové a organizačné výbory národných konferencií

Typ výboru	Programový	Organizačný	Programový i organizačný
Počet členstiev	0	0	0

9.5. Členstvo v redakčných radách časopisov

9.6. Činnosť v domácich vedeckých spoločnostiach

9.7. Iné dôležité informácie o vedecko-organizačných a popularizačných aktivitách

Propagácia VS SAV a superpočítača AUREL na podujatí s medzinárodnou účasťou "ICT Proposers' Day 2016", ktoré sa konalo v dňoch 26-27 septembra v Bratislave. VS SAV prezentovalo poster o architektúre superpočítača AUREL, o službách ponúkaných v rámci oddenia VVT - vysokovýkonnej výpočtovej techniky a možnosti, či už priamej spolupráce s VS SAV alebo spolupráce prostredníctvom organizácie PRACE, ktorej je VS SAV partnerom.

10. Činnosť knižnično-informačného pracoviska

10.1. Knižničný fond

Tabuľka 10a Knižničný fond

Knižničné jednotky spolu		
z toho	knihy a zviazané periodiká	
	audiovizuálne dokumenty	
	elektronické dokumenty (vrátane digitálnych)	
	mikroformy	
	iné špeciálne dokumenty - dizertácie, výskumné správy	
Počet titulov dochádzajúcich periodík		
z toho zahraničné periodiká		
Ročný prírastok knižničných jednotiek		
v tom	kúpou	
	darom	
	výmenou	
	bezodplatným prevodom	
Úbytky knižničných jednotiek		
Knižničné jednotky spracované automatizovane		

10.2. Výpožičky a služby

Tabuľka 10b Výpožičky a služby

Výpožičky spolu		
z toho	odborná literatúra pre dospelých	
	výpožičky periodík	
	prezenčné výpožičky	
MVS iným knižniciam		
MVS z iných knižníc		
MMVS iným knižniciam		
MMVS z iných knižníc		
Počet vypracovaných bibliografií		
Počet vypracovaných rešerší		

10.3. Používatelia

Tabuľka 10c Používatelia

Registrovaní používatelia	
Návštevníci knižnice spolu (bez návštevníkov podujatí)	

10.4. Iné údaje

Tabuľka 10d Iné údaje

On-line katalóg knižnice na internete (1=áno, 0=nie)	
Náklady na nákup knižničného fondu v €	

10.5. Iné informácie o knižničnej činnosti

11. Aktivity v orgánoch SAV

11.1. Členstvo vo Výbore Snemu SAV

11.2. Členstvo v Predsedníctve SAV a vo Vedeckej rade SAV

11.3. Členstvo vo vedeckých kolégiách SAV

11.4. Členstvo v komisiách SAV

Pavol Herda

- Komisia SAV pre komunikáciu a médiá (člen)

Ing. Michal Kadúc

- Komisia SAV pre informačné a komunikačné technológie (člen)

Ing. Tomáš Lacko

- Komisia SAV pre informačné a komunikačné technológie (člen)

11.5. Členstvo v orgánoch VEGA

12. Hospodárenie organizácie

12.1. Výdavky PO SAV

Tabuľka 12a Výdavky PO SAV (v €)

V ý d a v k y	Skutočnosť k 31.12.2016 spolu	v tom:			
		zo ŠR od zriaďovateľ a	z vlastných zdrojov	z iných zdrojov	z toho: ŠF EÚ
Výdavky spolu	1 342 177,33	931 010,87	49 363,18	361 803,28	268 488,19
Bežné výdavky	1 157 911,33	918 510,87	49 363,18	190 037,28	96 722,19
v tom:					
mzdy (610)	473 578,18	401 185,00	10 781,55	61 611,63	7 925,48
poistné a príspevok do poisťovní (620)	165 970,93	140 310,00	4 187,03	21 473,90	2 704,93
tovary a služby (630)	425 327,19	336 765,87	34 211,19	54 350,13	33 490,16
z toho: časopisy	265,83	265,83			
VEGA projekty	5 514,00	5 514,00			
MVTS projekty					
CE					
vedecká výchova					
bežné transfery (640)	93 035,03	40 250,00	183,41	52 601,62	52 601,62
z toho: štipendiá					
transfery partnerom projektov	52 700,74		99,12	52 601,62	52 601,62
Kapitálové výdavky	184 266,00	12 500,00		171 766,00	171 766,00
v tom:					
obstarávanie kapitálových aktív	12 500,00	12 500,00			
kapitálové transfery	171 766,00			171 766,00	171 766,00
z toho: transfery partnerom projektov	171 766,00			171 766,00	171 766,00

12.2. Príjmy PO SAV

Tabuľka 12b Príjmy PO SAV (v €)

P r í j m y	Skutočnosť k 31.12.2016 spolu	v tom:	
		rozpočtové	z mimorozp. zdrojov
Príjmy spolu	1 320 277,80	1 003 433,49	316 844,31
Nedaňové príjmy	42 422,62	42 422,62	0,00
v tom:			
príjmy z prenájmu			
príjmy z predaja výrobkov a služieb	42 422,62	42 422,62	
iné			
Granty a transfery (mimo zdroja 111)	316 844,31	0,00	316 844,31
v tom:			
tuzemské	255 930,66		255 930,66
z toho: APVV			
iné	255 930,66		255 930,66
zahraniczne	60 913,65		60 913,65
z toho: projekty rámcového programu EÚ	60 913,65		60 913,65
iné			

13. Nadácie a fondy pri organizácii SAV

14. Iné významné činnosti organizácie SAV

Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku

Rok 2016 bol z pohľadu správy Stálej výstavy dejín výpočtovej techniky na Slovensku (SVDVT) prelomový v tom zmysle, že vďaka nezištnému podporovateľovi p. Jozefovi Šovčíkovi nastúpil v októbri do práce doc. Ing. Martin Šperka, CSc. a začalo sa obdobie postupného odovzdávania vedenia SVDVT. Súčasťou je aj inventúra zbierkových predmetov a knižných jednotiek v Historickej knižnici. Od mája do novembra pracoval pre SVDVT Ing. Branislav Štofko, zamestnanec ui42 s.r.o., ktorý revidoval webovú stránku SVDVT a zaviedol novú rubriku Pohľady do histórie. Starostlivosť o ďalšie dopĺňovanie webovej stránky a vedenie exkurzií prevzal doc. Šperka. Je predpoklad, že sa inventúry skončia v prvom polroku 2017 a k 1. 7. 2017 dôjde k personálnej výmene na poste vedúceho SVDVT. Úspešné bolo aj pokračovanie Extrapolácií v roku 2016 a je predpoklad rozvíjať túto aktivitu aj v roku 2017. Javí sa celkom reálne, že v roku 2017 sa podarí zorganizovať Slovenské distribuované múzeum počítačov a aj aktivizovať prispievateľov do rubriky Pohľady do histórie, aby sme takto zaručili, že nzbierané predmety budú mať svoje príbehy a budú zaujímavé aj o 50 rokov.

V roku 2016 sa priestoroch SVDVT uskutočnilo 45 podujatí s 561 návštevníkmi, z toho bolo 27 exkurzií z 19 škôl, 5 exkurzií pre návštevy zo zahraničia, 5 exkurzií pre odbornú verejnosť a 8 pracovných stretnutí.

OPS – Odbor počítačovej siete

Odbor počítačovej siete (OPS) Výpočtového strediska SAV prevádzkuje chrbticovú sieť SAV v areáli Patrónka, v meste Bratislava (ústavy mimo Patrónky) a na Považí (Trnava, Smolenice, Piešťany). Sieť SAV je do internetu pripojená pomocou siete SANET. Výpočtové stredisko SAV je jedným z uzlov siete SANET a odbor počítačovej siete je správcom tohto uzla. Do prevádzky siete SAV spadá zabezpečenie konektivity zelených hraníc, monitorovanie stavu siete, pridelovanie IP adries, komunikácia so správcami počítačovej siete jednotlivých ústavov.

Počas roka bol zrealizovaný prechod chrbticovej siete SANETu z 10 Gb/s na 100 Gb/s, čo z hľadiska pripojenia koncových bodov umožňuje zvýšenie ich prenosovej rýchlosti na 10Gb/s. V areáli Patrónka zabezpečujú prevádzku zelených hraníc zariadenia, ktoré tam boli inštalované v rokoch 2008 až 2010. To znamená, že bežia 24 hodín denne viac ako 7 rokov. Tento fakt sa prejavuje zvýšenou poruchovosťou najmä napájacích zdrojov daných zariadení. V najbližších rokoch predpokladáme výmenu celých zariadení za nové s prihliadnutím už aj na zvýšenie prenosovej rýchlosti na 10 Gb/s, to však závisí od pridelených finančných prostriedkov.

V projekte SANET do škôl boli v roku 2016 úspešne pripojené školy v Senci. Finančne sa na projekte podieľal SANET. Výpočtové stredisko SAV bolo koordinátorom prác.

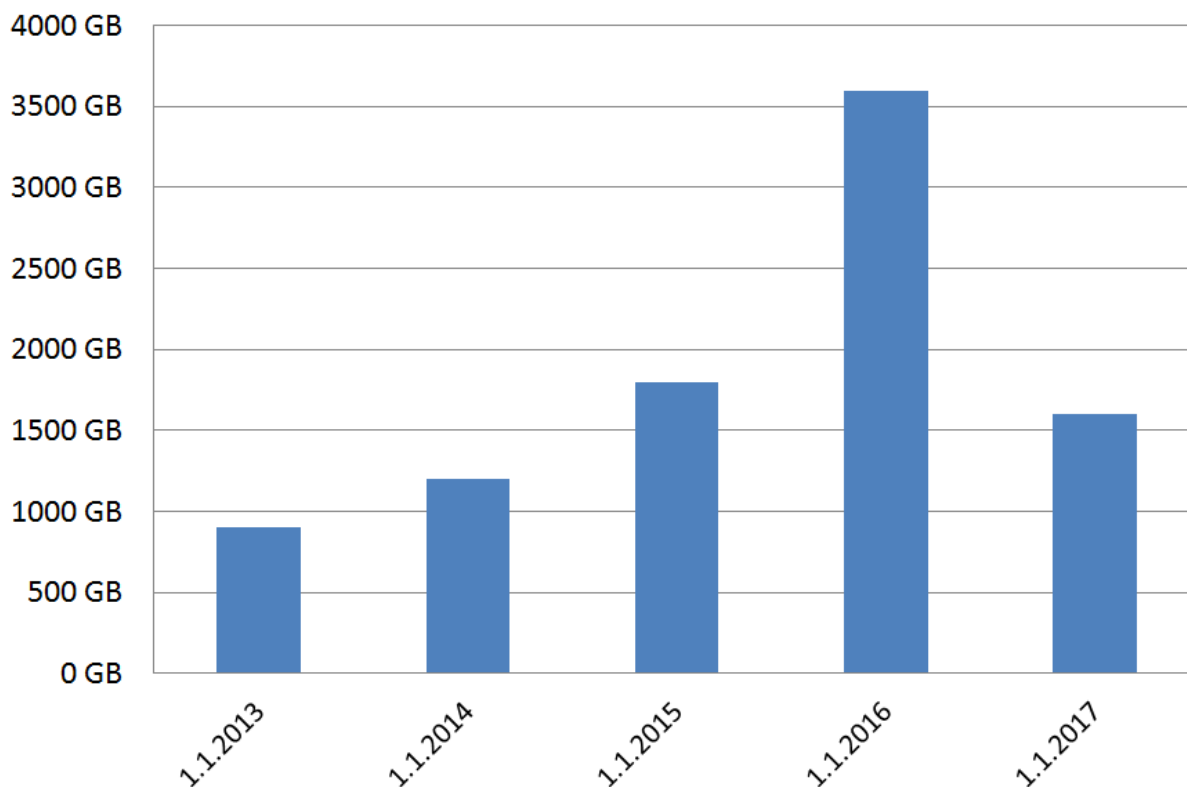
OSS - Odbor sieťových služieb

Centrálny mailový systém

Hlavnou úlohou odboru sieťových služieb je prevádzka centrálnych mailových služieb. Tieto sú prevádzkované na viacerých serveroch vo virtualizačnom prostredí VMware v Bratislave s využitím mailového systému Zimbra.

Kapacita potrebná na udržanie všetkých používateľských mailov sa počas rokov stále zvyšuje a preto bolo potrebné pristúpiť k zefektívneniu ukladania mailových správ. V priebehu roku sme integrovali nový systém uchovávaní mailových správ. Tým sa nám podarilo ušetriť 50% diskovej kapacity. Ako vidieť z priložených údajov, je veľkosť potrebnej kapacity v porovnaní s predchádzajúcim rokom menej ako polovičná.

Vývoj veľkosti potrebnej diskovej kapacity



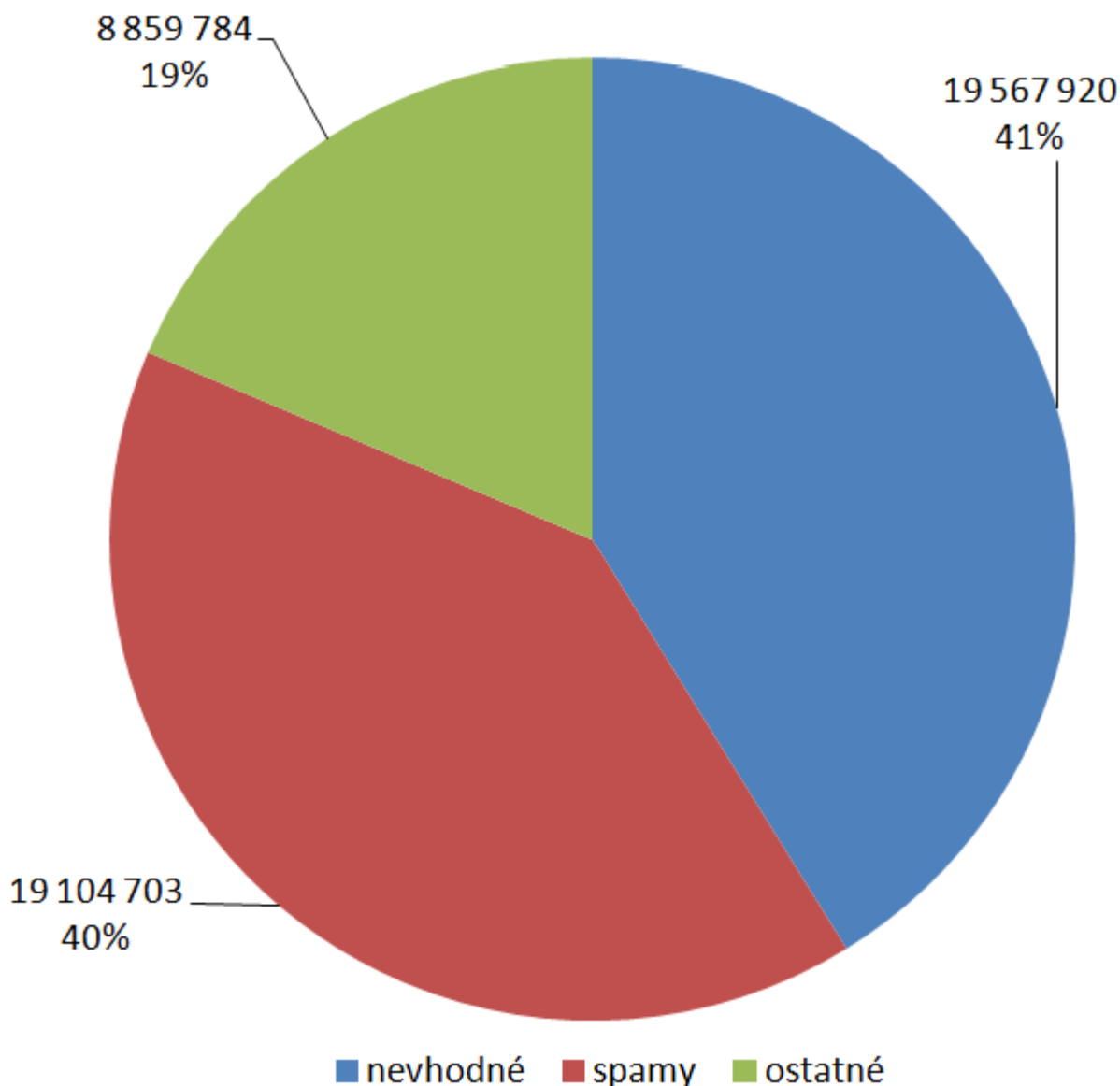
Rok	2013	2014	2015	2016	2017
Kapacita	900 GB	1800 GB	1800 GB	3600 GB	1600 GB

V súčasnosti je na centrálnych mailových serveroch prevádzkovaných vyše 3500 používateľských mailových schránok.

Z pohľadu počtu mailov bolo používateľom doručených menej mailov ako za predchádzajúci rok. Z priložených údajov je možné vidieť, že počet nevhodných správ, ktoré systém automaticky odstránil vzrástol skoro o polovicu. Celkovo sa úspešnosť identifikácie nevyžiadanej pošty oproti minulému roku zlepšila a pohybuje sa na úrovni viac ako 80%.

Rok	nevhodné	spamy	doručené	Spolu
2014	33 594 220	6 055 034	7 174 346	46 823 600
2015	13 419 164	19 108 076	9 237 873	41 765 113
2016	19 567 920	19 104 703	8 859 784	47 532 407

Mailové štatistiky za rok 2016



Problémy s nevyžiadanou poštou a blacklistami

Tak ako po minulé roky aj v roku 2016 veľké množstvo nevyžiadanej pošty so žiadosťami o zaslanie prihlasovacích údajov k používateľským kontám. Každý mesiac sa našlo zopár používateľov, ktorí na takéto výzvy zareagovali. Snažili sme promptne reagovať a blokovať všetky prichádzajúce aj odchádzajúce maily podobného typu. Keďže blokovací mechanizmus nebol 100% účinný dochádzalo k odosielaniu veľkého množstva mailov (rádovo milióny za pár hodín). Z tohto dôvodu sa niektoré z našich mailových serverov dostali na blacklisty, čo spôsobovalo problémy s doručovaním mailov mimo SAV. Väčšinu blacklistov sa snažíme kontrolovať a riešiť prípadné vymazanie našich mailových serverov z týchto blacklistov.

Poskytovanie virtuálnych serverov pre organizácie SAV

Vo Výpočtovom stredisku SAV je prevádzkované virtualizačné prostredie VMware, ktoré umožňuje poskytovanie centrálnych zdrojov organizáciám SAV formou virtuálnych serverov. V súčasnosti sú prevádzkované viaceré servery, ktorá slúžia hlavne na zálohovanie vedeckých dát ale aj ako testovacie prostredie.

V priebehu roku 2016 sa podarilo zakúpiť nové optické prepínače pre zvýšenie rýchlostí prístupov serverov k dátam umiestnených na diskovom poli. Táto nová sieťová infraštruktúra bude daná do

prevádzky počas roku 2017.

Virtualizačné prostredie pozostáva zo 6 serverov, z ktorých 4 servery sú v umiestnené Bratislave a 2 záložné servery sú prevádzkované v detašovanom pracovisku v Žiline. Jednotlivé prostredia sú navzájom prepojené pomocou zabezpečeného prepojenia s rýchlosťou viac ako 100Mbit/s.

VoIP

Tak ako po iné roky aj v roku 2016 sme zabezpečovali poskytovanie telefónnej služby na báze IP telefónie pre vybrané ústavy SAV. Využívali sme na to systém OVS v.5.0. zakúpený ešte v roku 2012.

Pre prevádzku boli použité virtuálne servery v prostredí VMware. V priebehu roka sme riešili len niekoľko drobných bezpečnostných incidentov a technických porúch. Prevádzka bola počas väčšiny roku stabilná a bezproblémová.

Vypomáhali sme konzultáciami ústavom ktoré sa sťahujú do areálu SAV na Patrónke a plánujú sa pripojiť k systému v nasledujúcom roku. Konkrétne sa jedná o ústavy UBGŽ a Ústav hydrologie.

Videokonferencia

V tomto roku sme vypomáhali pri organizovaní videokonferencie pre akciu EXTRAPOLÁCIE 2016, organizovanej Ústavom informatiky a akciu SESAME NET 4TH BEST PRACTICE WORKSHOP, pripravenej kolegami z oddelenia VVT. Počas celého roka sme mali k dispozícii platformu Cisco-Telepresence z národného projektu „Národná teleprezentačná infraštruktúra pre podporu výskumu, vývoja a transferu technológií“. V priestoroch Výpočtového strediska SAV sú nainštalované dva koncové body systému. Jeden - označený ako TELE-042 je určený pre 10 osôb a je umiestnený v učebni (miestnosť č.2) a druhý označený ako TELE-168 je určený pre individuálneho účastníka a je inštalovaný v knižnici (miestnosť č.3).

Aktivity k získaniu projektov v spolupráci s praxou a ďalšími štátnymi a výskumnými organizáciami

V jarných mesiacoch sme rokovali o spolupráci na spoločnom projekte zo ŠF EÚ so spoločnosťou Crosat Austria GmbH a dvomi domácimi spoločnosťami - pokus zlyhal na významnom nesúlade s potrebnými finančnými prostriedkami a disponibilnými u žiadateľa púrojektu. V tomto projekte by Výpočtové stredisko SAV vystupovalo ako spoluriešiteľ v oblasti virtualizačnej a cloudovej technológie.

OIS - Odbor informačných systémov

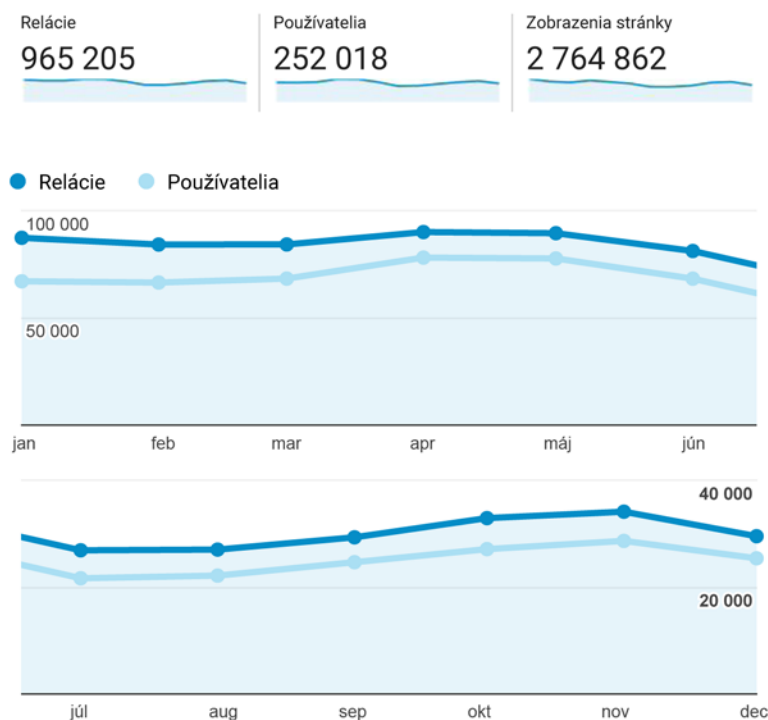
WEBSAV

Aj v roku 2016 boli na webovom portáli SAV vykonávané úlohy permanentného charakteru, medzi ktoré patrí kontrola aktuálnosti údajov, správnej funkčnosti všetkých sekcií, po prípade odstraňovanie vzniknutých chýb atď.

Počas roka prebehla celková úprava grafického dizajnu a obsahovej štruktúry webového portálu Správy SAV. Dizajn stránok bol zmenený podľa moderných požiadaviek s dôrazom na prehľadnosť a celkové upútanie návštevníka stránky. Ako nová funkcionálna bola pridaná meniacia sa upútavka na nové číslo v hlavičke stránky, možnosť on-line prezerania vydaní priamo v prehliadači pomocou prezerateľnej funkcie a upútavky z najnovšieho čísla na úvode stránky.

Na portáli SAV sa v priebehu roka vytvoril systém akreditácií na zverejňovanie materiálov pre hodnotenie organizácií SAV. Začiatkom roka pribudla prierezová stránka Výskumná infraštruktúra SAV, ktorá prehľadne zobrazuje organizácie SAV v tematických okruhoch, ktorým sa venujú. Na web stránku SAV pribudol kalendár vedeckých podujatí konajúcich sa v danom mesiaci.

Podľa štatistík návštevnosti portálu SAV je vidieť, že celkový počet relácií za rok 2016 presiahol 965 000 a počet unikátnych používateľov a používateľiek prekročil 252 000 (obr. č. 1).



Obrázok č. 1

V návštevnosti podľa krajín je Slovensko zastúpené v takmer 89% prípadoch, nasleduje Česká republika so skoro 3%-ným podielom návštevnosti. Nasledujú ďalšie krajiny, ktoré majú podiel pohybujúci sa pri jednom percente návštevnosti (obr. č. 2).

Krajina	Relácie
	965 205
1. Slovakia	846 048 (87,65 %)
2. Czech Republic	25 323 (2,62 %)
3. China	10 369 (1,07 %)
4. United States	9 421 (0,98 %)
5. Germany	8 700 (0,90 %)
6. India	6 346 (0,66 %)
7. Russia	5 279 (0,55 %)
8. United Kingdom	4 712 (0,49 %)
9. Austria	4 347 (0,45 %)
10. Poland	3 404 (0,35 %)

Obrázok č. 2

Návštevníkmi najčastejšie používaným webovým prehliadačom v roku 2016 už nebol Firefox, tak ako v predchádzajúcom období, ale nahradil ho prehliadač Chrome, ktorý preferuje takmer 37% používateľov a používateľiek (obr. č. 3). Tesne za ním nasleduje Firefox a prvé priečky uzatvára Internet Explorer. Táto trojica prehliadačov tvorí spolu približne 91% prístupov.

Prehliadač	Relácie
	965 205
1. Chrome	356 453 (36,93 %)
2. Firefox	333 850 (34,59 %)
3. Internet Explorer	186 986 (19,37 %)
4. Safari	33 815 (3,50 %)
5. Opera	19 552 (2,03 %)
6. Edge	14 553 (1,51 %)
7. Android Browser	11 738 (1,22 %)
8. Safari (in-app)	1 755 (0,18 %)
9. UC Browser	1 331 (0,14 %)
10. Maxthon	1 281 (0,13 %)

Obrázok č. 3

ELVYS

V systéme ELVYS (Elektronická výročná správa organizácie) boli aj v roku 2016 uskutočnené zmeny na základe požiadaviek P SAV a organizácií SAV. Bol aktualizovaný modul na vkladanie voľných textov, nakoľko starší už nespĺňal bezpečnostné a ani základné funkcionality súvisiace s prechodom na nové verzie webových prehliadačov. Do systému bola pridaná možnosť vložiť emeritného pracovníka, ktorý sa premietne do VYS. VS SAV pre systém ELVYS počas roka zabezpečovalo hot-line podporu pre všetkých pracovníkov SAV. Uskutočnili sme viacero školení a konzultácií. V rámci podpory bolo zodpovedané e-mailami a telefonicky na množstvo otázok a podnetov. Hot-line je pre taký rozsah databáz a pracovísk nevyhnutná a často využívaná v priebehu celého roka, predovšetkým však na prelome rokov, a to hlavne riaditeľmi a vedeckými tajomníkmi organizácií SAV.

ĎALŠIE AKTIVITY

Medzi ďalšie aktivity OIS patrí aj správa centrálnych webových serverov SAV, kde boli počas roka 2016 opäť evidované neželané útoky na servery a webové stránky. Išlo hlavne o útoky typu FTP brute-force attack, HTTP flood attacks, XSS (Cross-site scripting), CMS attacks a ďalšie. VS SAV v maximálnej možnej miere eliminovalo tieto útoky a v prípade napadnutia niektorej webovej stránky, pomáhalo pri odstraňovaní následkov útoku, či už ošetrovaním PHP kódu, "update-om" CMS systémom, zmenou hesiel a pod.

V roku 2016 OIS udržiaval aktuálne údaje na webovom portáli KC Smolenice SAV a bezodplatne bola zabezpečená aktuálnosť jedálneho lístka v stravovacom zariadení na bratislavskej Patrónke (webová stránka www.stravovanie.sav.sk).

VVT

Prevádzka HPC techniky

Prístupy

V roku 2016 sa na registračnom portáli SIVVP registrovalo 19 nových používateľov, ktorí tak získali prístup na superpočítač Aurel a výpočtový klastor v Žiline.

Celkovo evidujeme 171 registrovaných používateľov zo 45 pracovísk. Najviac používateľov má Prírodovedecká fakulta UK (33), nasledovaná Ústavom anorganickej chémie SAV (17), Fakultou

matematiky, fyziky a informatiky UK (13) a Fyzikálnym ústavom SAV (11).

Evidencia projektov

Od februára 2016 môžu na superpočítači počítať len používatelia, ktorí sú zaevidovaní v novom systéme projektov. V ňom prechádzajú všetky projekty kontrolou Projektového výboru – ten však zatiaľ kontroluje projekty len po formálnej stránke, neposudzuje zatiaľ vedecké ani technické kvality predkladaných projektov.

Zoznam projektov z roka 2016 je uvedený v nasledovnej tabuľke:

Názov projektu	Zodp. riešiteľ	Pracovisko
SERCA	Magdaléna Majeková	ÚEFaT SAV
Effect of hydration on the reactivity of iodine compounds	Ivan Černušák	PriF UK
Približné metódy zahrnutia disperzných interakcií v rámci DFT	Tomáš Bučko	PriF UK
Immunogenic sites of intrinsically disordered proteins	Rostislav Škrabana	NEI SAV
Atómová štruktúra a mechanizmus stability kvázikryštálov	Marek Mihalkovič	FÚ SAV
Nové fázy a fázové prechody v kondenzovaných látkach	Roman Martoňák	FMFI UK
Presné kvantovo-chemické štúdium nekovalentných interakcií	Michal Pitoňák	PriF UK
Chirálné zlúčeniny prechodných prvkov so zameraním na vanád: interakcia experimentu a teórie pri syntéze a charakterizácii	Ján Šimuněk	PriF UK
Nové kovové materiály na účinnú katalýzu chemických reakcií	Marián Krajčí	FÚ SAV
Identifikácia a charakterizácia potenciálu lokálnych efektov pomocou robustného numerického modelovania seizmického pohybu	Jozef Kristek	ÚVoZ SAV
SiNaCrys	Ivan Štich	FÚ SAV
Properties of molecules and clusters from the first principles calculations	Andrej Antušek	MTF STU
Quantum modelling of structural and electronic properties of solids	Roman Martoňák	FMFI UK
Druhová a genetická diverzita - k lepšiemu pochopeniu evolúcie	Dušan Senko	BÚ SAV
Modelovanie atmosférickej chémie cézia, kadmia a jódu	Ivan Černušák	PriF UK
COMPLEX	Martin Breza	FCHPT STU

Na výpočtovom klastri v Žiline podobne obmedzenia zatiaľ neplatia, takže používať ho môžu automaticky všetci registrovaní používatelia.

Štatistiky využívania

Na našej stránke sú tiež uvedené pravidelne (v mesačných intervaloch) aktualizované štatistiky využívania superpočítača Aurel: <http://www.vs.sav.sk/?section=departments&sub=vvt&sub2=stat>
 V nasledovnej tabuľke je uvedený ročný sumár spotreby strojového času pre jednotlivé pracoviská:

Pracovisko	Spotrebovaný stroj. čas (tisícky CPUhodín)
Prírodovedecká fakulta UK	3164
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK	2504
Fyzikálny ústav SAV	1823
Ústav anorganickej chémie SAV	599
Neuroimunologický ústav SAV	57
Výpočtové stredisko SAV	45
Materiálovotechnologická fakulta STU	4
Ústav vied o zemi SAV	1

Evidencia výstupov

Na registračnom portáli za rok 2016 evidujeme 28 nových výstupov (publikácií) z projektov (celkovo je ich už 82). Ich úplný zoznam je dostupný cez odkaz: <http://www.vs.sav.sk/?section=departments&sub=vvt&sub2=publications>

Používateľská podpora

V tomto roku sme spustili nový elektronický systém na komunikáciu s používateľmi a evidenciu riešených problémov a požiadaviek. Doteraz v ňom evidujeme 23 uzatvorených tiketov. Veľká časť komunikácie však stále prebieha cez mail, prostredníctvom oficiálnej adresy používateľskej podpory (hpcsupport@savba.sk) alebo cez mailové adresy jednotlivých zamestnancov VS SAV.

Monitoring

Počas roka prebiehal štandardný monitoring a servis zariadení VVT a príslušnej infraštruktúry vo VS SAV v Bratislave a na detašovanom pracovisku v Žiline. Na superpočítači Aurel bolo vykonaných 5 hardvérových servisných zásahov s externou účasťou pracovníka IBM a výmenou komponentov (týkali sa externého diskového poľa, zdrojov napájania a optického subsystemu). Okrem toho boli potrebné ďalšie zásahy na externom diskovom poli a systéme záložných zdrojov diskového poľa (náhradné diely boli zakúpené z interných zdrojov VS SAV). V rámci platenej technickej podpory bola riešená desiatka požiadaviek súvisiacich prevažne s paralelným súborovým systémom a optickým subsystemom.

Monitorovací systém Nagios prešiel v priebehu roka aktualizáciou a boli k nemu doprogramované ďalšie moduly (prevažne pre výpočtový klaster na detašovanom pracovisku v Žiline). Prebehla prípravná fáza na integráciu superpočítača do systému Nagios – všetky komponenty dôležité pre plynulý beh superpočítača sú monitorované do textových logov. Aktualizáciou prešli aj podporné servery monitoringu (aktualizácie operačných systémov, knižníc a aplikačného vybavenia serverov).

Chladiaci systém si v roku 2016 vyžiadala 15 servisných zásahov, ale žiadna z porúch alebo zásahov nevedli k narušeniu prevádzky superpočítača.

Poruchy a opravy

Výpadky a odstávky výpočtovej infraštruktúry v roku 2016 sú zhrnuté v nasledovnej tabuľke, červenou farbou sú označené udalosti, kedy došlo k nedostupnosti systému z dôvodu poruchy.

Začiatok	Koniec	Trvanie (#dní)	Dôvod	Lokalita
8.2.2016	9.2.2016	2	Zmeny v prevádzke	Bratislava
8.3.2016	9.3.2016	2	Aktualizácie firmvéru a OS	Bratislava
3.5.2016	6.5.2016	4	Rekonfigurácia GPFS	Žilina
24.5.2016	25.5.2016	2	Aktualizácia OS	Bratislava
4.7.2016	4.7.2016	1	Výpadok elektrickej energie	Bratislava
22.7.2016	24.7.2016	3	Odstávka elektrickej energie	Žilina
12.8.2016	15.8.2016	4	Výpadok elektrickej energie	Bratislava
11.10.2016	12.10.2016	2	Aktualizácie firmvéru a OS	Bratislava
4.11.2016	10.11.2016	7	Problém s diskovým poľom a GPFS	Bratislava
22.12.2016	22.12.2106	1	Výpadok SAN	Bratislava

Školenia

V januári 2016 sme organizovali medzinárodný workshop PRACE Winter School 2016 - "Density functional theory from the perspective of HPC", ktorého sa zúčastnilo 36 zúčastníkov zo 4 krajín. Prednášalo na ňom 8 špičkových expertov na rôzne aspekty použitia metódy DFT v aplikačnej praxi.

VS SAV sa prvýkrát zapojilo do letného edukačného programu PRACE Summer of HPC, v rámci ktorého riešia vybraní študenti projekty priamo vo významných európskych HPC strediskách. Dvaja študenti z Írska a Grécka na našom pracovisku riešili vedecké projekty pod vedením Prof. Nogu a Doc. Pitoňáka.

Vizualizačné pracovisko s 3D zariadením

Vizualizačné pracovisko poskytuje v rámci úloh VVT hardvérové a softvérové prostriedky pre používateľov a riešiteľov výskumných projektov pre vizualizáciu veľkoobjemových dát. Pre tieto účely je k dispozícii vysokovýkonná grafická stanica na samotné spracovanie a prípravu dát a zariadenie Visbox na zobrazenie dát v 3D – stereo zobrazení.

Z hľadiska SW vybavenia je k dispozícii :

1. Softwarový systém **Visit**
2. Multiplatformový systém **Paraview** , ktorý umožňuje spoluprácu distribuovaných prostriedkov buď v režime interaktívnom , alebo dávkovom.
3. Pre účely 3D modelovania, simulácií a animácií je k dispozícii výkonný software **Cinema 4D**
4. Pre účely simulácií a modelovania rozsiahlych multiagentných systémov je implementovaný systém **REPAST** umožňujúci pracovať s rádovo 10 na 6 agentami.

Aktivity k získaniu projektov v spolupráci s praxou a ďalšími štátnymi výskumnými a výskumnými organizáciami

V súvislosti s hľadaním spolupráce s praxou a spoločného využitia superpočítača, sme sa po skončení obdobia implementácie projektu SIVVP začali zaujímať spätne o už raz vykonaný kontakt smerom k SHMÚ. Stretnutie sa uskutočnilo za prítomnosti generálneho riaditeľa Dr. Benku, vedúceho odboru IS Mgr. Chovana a vedúcej odboru numerických výpočtov. Spolupráca pri priamom využívaní zakúpenej techniky však nebude možná. Jeden z dôvodov je finančný - počítanie by si museli hradiť a sami majú problémy dostatočne vykryť vlastnú spotrebu ich superpočítača a druhý dôvod je technický - pre svoje výpočty potrebujú špecifické výpočtové prostredie, takže zapožičiavanie si výpočtovej kapacity v danej chvíli nie je možné. Rozišli sme sa však po dohode kontakty naďalej udržiavať a v prípade novej spoločnej úlohy v oblasti modelovania sa budeme vedieť dohodnúť.

Zúčastnili sme sa dvoch pracovných stretnutí na pôde Slovalca, a.s., kde sa ukazoval veľmi pekný problém na riešenie - Heat balance pri tavbe hliníka. Máme vytvorený predbežný riešiteľský tím, ktorý zatiaľ čaká na príležitosť problém riešiť. Hľadá cesta, ako by bolo možné riešiť otázku financovania (uvažovali sme aj o ŠF EÚ) a vytvoriť širšie partnerstvo, keďže v Slovalcu už jedného partnera majú. Tu problém nie je až taký veľký, lebo by sme sa vedeli veľmi pekne navzájom doplniť, je tu väčší problém práve v otázke financovania a rýchlejšieho postupu pri rozhodovaní na strane majiteľov Slovalca.

Chceme sa tiež vrátiť do rozhovorov s letiskom Štefánik, kde sme sa pred niekoľkými rokmi pokúšali otvoriť spoločný projekt na hlukové mapy, ktoré by bolo možné generovať simuláciou prevádzky letiska na vytvorenom modeli. V tom čase uprednostňovali priame merania a našu ponuku na spoluprácu zamietli.

Otvorení sme aj ďalšími príležitosťami, ktoré budeme musieť samozrejme trpezlivo hľadať. Všetci veľmi dobre vieme, ako to na Slovensku s priemyslom vypadá a aké požiadavky na spoluprácu môžeme očakávať. Zatiaľ musíme silne podporovať rozvoj HPC na Slovensku v oblasti vedy a výskumu. Dobrá vec nepotrebuje reklamu - chváli sa sama a priťahuje príležitosti.

Propagačná činnosť

Grafické pracovisko sa po celý rok zameralo na grafickú a propagačnú činnosť, buď v podobe grafických návrhov plagátov či tvorbe časopisov.

K 25. výročiu SANETU grafické pracovisko navrhlo a zalomilo 94 stranovú publikáciu v slovenskej i anglickej verzii v kooperácii so všetkými správcami uzlov a s Ing. Štefanom Kohútom, spoluautorom, ktorý sa podieľal na publikácii po textovej stránke.

K 60. výročiu založenia ÚI SAV pripravilo pracovisko grafický návrh a zalomenie propagačných materiálov ÚI SAV určených na workshop v Bratislave.

Na Workshope ICT Proposer's Day /odborné dvojdnové networkingové stretnutie k informačným a komunikačným technológiám/, ktorý sa konal v Bratislave, s celosvetovou účasťou v termíne 26. 9. - 27. 9. 2016, sa VS SAV prezentovalo jedným posterom v rozmere A0 a letákmi - zmenšenou verzou posteru, v rozmere A4. Pre Ústav Informatiky SAV bol vytvorený návrh a zalomenie dokumentu v rozsahu 44 strán v rozmere A4, v ktorom sa prezentovali všetky oddelenia ÚI SAV a návrh zakladača v slovenskej a anglickej verzii

Časopis Výpočtového strediska SAV: HPC FOCUS

Vizualizačné pracovisko VS SAV pripravuje tretie vydanie časopisu HPC FOCUS zameraného nielen pre používateľov superpočítača Aurel, ale aj pre širokú verejnosť, ktorá bude okrem iného priebežne oboznamovaná s významnými výsledkami dosiahnutých s využitím superpočítača Aurel.

ODB - Odbor dátovej bezpečnosti

VS SAV je styčným pracoviskom pre program SELECT, zmluvy medzi Ministerstvom školstva SR a firmou Microsoft ktorá poskytuje softvér tejto firmy pre akademické inštitúcie za znížené ceny. V roku 2016 si ústavy SAV v rámci tejto zmluvy prostredníctvom zmluvného partnera, firmou EXE zakúpili produkty Microsoftu v celkovom objeme 281 licencií. Inštalačné nosiče im poskytlo VS SAV.

Zhruba 60% licencií predstavoval produkt MS Office, zvyšok vo väčšine operačný systém Windows a serverové produkty.

OfficeMacStd 2016 SNGL MVL	10
OfficeMultiLangPk 2013 SNGL MVL	3
OfficeProPlus 2016 SNGL MVL	108
OfficeProPlus SNGL LicSAPk MVL	1
OfficeStd 2016 SNGL MVL	65
SkypeforBsnss 2016 SNGL MVL	1
SQLCAL 2016 SNGL MVL UsrCAL	15
SQLSvrStd 2016 SNGL MVL	1
VSPro 2015 ALNG MVL	1
WinPro 10 SNGL Upgrd MVL	32
WinRmtDsktpSrvcsCAL 2016 SNGL MVL UsrCAL	15
WinSvrCAL 2012 SNGL MVL UsrCAL	3
WinSvrCAL 2016 SNGL MVL UsrCAL	15
WinSvrStd 2012R2 SNGL MVL 2Proc	1
WinSvrSTDCore 2016 SNGL MVL 2Lic CoreLic	8
WordMac 2016 SNGL MVL	2
Spolu	281

15. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie v roku 2016

15.1. Domáce ocenenia

15.1.1. Ocenenia SAV

15.1.2. Iné domáce ocenenia

15.2. Medzinárodné ocenenia

16. Poskytovanie informácií v súlade so zákonom č. 211/2000 Z. z. o slobodnom prístupe k informáciám v znení neskorších predpisov (Zákon o slobode informácií)

17. Problémy a podnety pre činnosť SAV

Bežná prax s prevádzkovaním superpočítača Aurel ukazuje na potrebu zabezpečenia finančných prostriedkov na pokrytie nákladov na elektrickú energiu pre celý kalendárny rok vo forme účelových prostriedkov. Predíde sa tým takým situáciám, ktoré v minulosti viedli k platobnej neschopnosti v poslednom štvrtroku alebo k vratkám prostriedkov. Tieto stavy sú spôsobené nastaveným výpočtovým výkonom superpočítača v prvom štvrtroku, kde spravidla prvé dva mesiace je superpočítač prevádzkovaný podľa situácie z predchádzajúceho roku a na aktuálny kalendárny rok ešte nie je z P SAV potvrdená informácia o schválenej a pridelennej výške finančných prostriedkov na energie.

Finančnú podporu prostredníctvom IKT bude v roku 2017 potrebné venovať postupnej obnove aktívnych prvkov na tzv. zelených hraniciach. Súčasný technický stav spomínaných zariadení už nie je na potrebnej úrovni a mnohé z nich sú už v prevádzke viac ako 6 až 8 rokov. Výpadok aktívneho prvku na zelenej hranici spôsobí nedostupnosť internetu pre daný ústav, čomu chceme predchádzať. V oblasti rozvoja informačných systémov SAV, predovšetkým produktu ELVYS je nevyhnutné dosiahnuť stav v zadávaní zmien tak, aby požiadavky na zmeny boli tímu programátorov známe v dostatočnom predstihu pred koncom kalendárneho roku a boli pre danú aktualizáciu záväzné. Predíde sa tým zbytočnému prepisovaniu kódu a zostane dostatok priestoru na odlaďovanie jednotlivých úprav a kódu ako celku.

Pre zabezpečenie plynulej prevádzky poskytovaných centrálnych sieťových služieb, budú potrebné aj v ďalších rokoch finančné prostriedky na obnovu a inováciu infraštruktúry, ktoré budeme žiadať prostredníctvom IKT. V minulosti sme pre zabezpečenie potrebných zdrojov sformulovali žiadosť o NFP zo štrukturálnych zdrojov, ktorá nám však nebola schválená. Vzhľadom na to, že financovanie z centrálnych zdrojov poskytuje len obmedzené možnosti na zakúpenie výkonnejšej infraštruktúry, finančná výpomoc zo ŠF EÚ rozvoju virtualizačnej infraštruktúry významným spôsobom pomôže. V prípade možnosti odpovedať na zodpovedajúcu výzvu žiadosťou o NFP, budeme očakávať v schvaľovacom procese podporu zo strany P SAV.

Výkonnejšia infraštruktúra umožní poskytnúť organizáciám SAV lepšie prostredie pre vykonávanie vedecko-výskumnej činnosti, poskytovaním väčšieho priestoru pre ukladanie produkčných dát, väčšieho obsahu mailových schránok, možnosti zbiehania vlastných aplikácií v cloudovom prostredí a pod.

Správu o činnosti organizácie SAV spracoval(i):

Riaditeľ organizácie SAV

.....
Ing. Michal Kadúc

Prílohy**Príloha A****Zoznam zamestnancov a doktorandov organizácie k 31.12.2016****Zoznam zamestnancov podľa štruktúry (nadväzne na údaje v Tabuľke 1a)**

	Meno s titulmi	Úväzok (v %)	Ročný prepočítaný úväzok
Vedúci vedeckí pracovníci DrSc.			
1.	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.	32	0.32
2.	prof. Ing. Ivan Plander, DrSc.	32	0.32
Samostatní vedeckí pracovníci			
1.	doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.	50	0.50
Vedeckí pracovníci			
1.	Mgr. Lukáš Demovič, PhD.	100	1.00
2.	Mgr. Jozef Federič, PhD.	100	1.00
3.	Mgr. Filip Holka, PhD.	50	0.50
Odborní pracovníci s VŠ vzdelaním (ostatní zamestnanci)			
1.	Ing. Tomáš Hlaváč	56	0.56
2.	Ing. Michal Kadúc	100	1.00
3.	Mgr. Anna Kavická	100	1.00
4.	Ing. Štefan Kohút	56	0.56
5.	Ing. Imrich Lenharčík	100	1.00
6.	Ing. Iveta Magulová	32	0.32
7.	Mgr. Dominika Mihálová	100	1.00
8.	Mgr. Štefánia Mučičková	100	1.00
9.	Ing. Pavol Novák	100	1.00
10.	RNDr. Gabriela Obadalová	100	1.00
11.	Ing. Monika Opálová	100	1.00
12.	Mgr. Matej Orság	100	1.00
13.	RNDr. Anton Pevala, CSc.	32	0.32
14.	Jaromír Suchánek, PhD.	100	1.00
15.	MSc. Miloslav Valčo	100	1.00
16.	RNDr. Ľubomír Valenčík, CSc.	100	1.00
17.	Ing. Viktor Valentíny	100	1.00
18.	Bc. Blažej Vučkovski	100	1.00
Odborní pracovníci ÚSV			
1.	Pavol Herda	100	1.00

2.	Soňa Hudecová	50	0.50
3.	Peter Jančár	100	1.00
4.	Peter Lukáč	100	1.00
5.	Martin Matúš	100	0.85
6.	Iveta Ruotolo	100	1.00
Ostatní pracovníci			
1.	Iveta Bouadjenak	32	0.24
2.	Anna Jurová	32	0.32

Zoznam zamestnancov, ktorí odišli v priebehu roka

	Meno s titulmi	Dátum odchodu	Ročný prepočítaný úväzok
Odborní pracovníci s VŠ vzdelaním (ostatní zamestnanci)			
1.	Ing. Tomáš Dobiš	30.11.2016	0.00
2.	Ing. Tomáš Lacko	30.11.2016	0.92
Odborní pracovníci ÚSV			
1.	Soňa Hudecová	31.12.2016	0.50
Ostatní pracovníci			
1.	Dana Matejkinová	31.3.2016	0.08

Zoznam doktorandov

	Meno s titulmi	Škola/fakulta	Študijný odbor
Interní doktorandi hradení z prostriedkov SAV			
<i>organizácia nemá interných doktorandov hradených z prostriedkov SAV</i>			
Interní doktorandi hradení z iných zdrojov			
<i>organizácia nemá interných doktorandov hradených z iných zdrojov</i>			
Externí doktorandi			
<i>organizácia nemá externých doktorandov</i>			

Zoznam emeritných vedeckých zamestnancov

	Meno s titulmi

Príloha B

Projekty riešené v organizácii

Medzinárodné projekty

Programy: Horizont 2020

1.) PRACE - Štvrtá fáza implementácie projektu (PRACE - Fourth Implementation Phase Project)

Zodpovedný riešiteľ:	Jozef Noga
Trvanie projektu:	1.2.2015 / 30.4.2017
Evidenčné číslo projektu:	653838
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	Forschungszentrum Jülich GmbH
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	24 - Rakúsko: 1, Belgicko: 1, Bulharsko: 1, Cyprus: 1, Česko: 1, Nemecko: 1, Dánsko: 1, Španielsko: 1, Fínsko: 1, Francúzsko: 1, Veľká Británia: 1, Grécko: 1, Maďarsko: 1, Švajčiarsko: 1, Írsko: 2, Izrael: 1, Taliansko: 1, Holandsko: 1, Nórsko: 1, Poľsko: 1, Portugalsko: 1, Slovinsko: 1, Švédsko: 1
Čerpané financie:	Horizont 2020: 96774 €

Dosiahnuté výsledky:

V rámci spolupráce s partnerskými organizáciami v oblasti WP3 a WP4 sme v regióne Slovenskej republiky vykonávali propagačnú činnosť a pri sprístupňovaní vysokovýkonnej výpočtovej techniky implementovali v rámci projektu SIVVP na viacerých podujatiach formou prednášok a prezentácií.

V rámci WP4 bol pripravený medzinárodný workshop pre vysokovýkonné počítanie, ktorý bol realizovaný v posledných januárových dňoch roku 2016 v priestoroch QUTE Fyzikálneho ústavu SAV a Výpočtového strediska SAV. K workshopu boli prizvaní odborníci z oblasti HPC, predovšetkým vybraných programových balíkov napr. Turbomole, CPMD, VASP a iné ako aj v oblasti programovania grafických akcelerátorov.

V rámci programu PRACE Summer of HPC sme hostili dvoch zahraničných študentov, ktorí u nás riešili vedecké projekty pod vedením doc. Pitoňáka a prof. Nogu. Ich výstupy sú uvedené na stránke projektu SoHPC.

Projekty národných agentúr

Programy: VEGA

1.) Presný a výpočtovo efektívny kvantovo chemický popis nekovalentných interakcií (Accurate and computationally efficient quantum chemical description of non-covalent interactions)

Zodpovedný riešiteľ:	Lukáš Demovič
Trvanie projektu:	1.1.2014 / 31.12.2017
Evidenčné číslo projektu:	
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	Prírodovedecká fakulta UK, Bratislava
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	1 - Slovensko: 1

Čerpané financie: VEGA: 5514 €

Dosiahnuté výsledky:

Kvantovo chemickými metódami DFT sme počítali nekovalentné interakcie kryštalických komplexov nikel – bipyridín. Výsledky sú sumarizované v článku, ktorý sa momentálne dokončuje a mal by byť publikovaný v roku 2017.

Nakonfigurovali a nainštalovali sme testovací stroj platformy Intel Xeon Phi pre vysokoparalelné výpočty, na ktorej chceme testovať paralelizáciu programov na výpočty nekovalentných interakcií.

Programy: Štrukturálne fondy EÚ Výskum a vývoj

2.) Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie - Konvergencia (*The Slovak Infrastructure for High Performance Computing - Convergence*)

Zodpovedný riešiteľ: Tomáš Lacko
Trvanie projektu: 15.1.2010 /
Evidenčné číslo projektu: OPVaV/NP/1/2010, ITMS 26210120002
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 4 - Slovensko: 4
Čerpané financie: Štrukturálne fondy OPVaV: 16629 €

Dosiahnuté výsledky:

Dňom 1. januára 2016 vstúpil projekt SIVVP do svojho päťročného monitorovacieho obdobia. Po ukončení implementačných prác na budovaní infraštruktúry pre HPC je potrebné naplniť ciele sformulované v Opise projektu. V tejto súvislosti boli aj s partnermi vykonané stretnutia na úrovni generálneho riaditeľa sekcie informatiky MŠ VVaŠ ako aj na sekcii vedy a techniky. Na pracovnom stretnutí počas konferencie UNINFOS v Banskej Bystrici a následne v Žiline boli prerokovávané so zástupcami partnerských inštitúcií v projekte SIVVP možnosti vytvorenia konzorcia ako národnej platformy pre HPC s možnosťou partnerstvo rozšíriť. Aktivity v súvislosti s vytvorením národnej platformy pre HPC prechádzajú do roku 2017.

3.) Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie – Regionálna konkurencieschopnosť a zamestnanosť (*The Slovak Infrastructure for High Performance Computing - Regional Competitiveness and Employment*)

Zodpovedný riešiteľ: Tomáš Lacko
Trvanie projektu: 15.1.2010 /
Evidenčné číslo projektu: OPVaV/NP/2/2010, ITMS 26230120002
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Čerpané financie: Štrukturálne fondy EÚ Výskum a vývoj: 27492 €

Dosiahnuté výsledky:

Dňom 1. januára 2016 vstúpil projekt SIVVP do svojho päťročného monitorovacieho obdobia. Po ukončení implementačných prác na budovaní infraštruktúry pre HPC je potrebné naplniť ciele

sformulované v Opise projektu. V tejto súvislosti boli aj s partnermi vykonané stretnutia na úrovni generálneho riaditeľa sekcie informatiky MŠ VVaŠ ako aj na sekcii vedy a techniky. Na pracovnom stretnutí počas konferencie UNINFOS v Banskej Bystrici a následne v Žiline boli prerokovávané so zástupcami partnerských inštitúcií v projekte SIVVP možnosti vytvorenia konzorcia ako národnej platformy pre HPC s možnosťou partnerstvo rozšíriť. Aktivity v súvislosti s vytvorením národnej platformy pre HPC prechádzajú do roku 2017.

Programy: Vnútroústavné

4.) ELVYS (ELVYS)

Zodpovedný riešiteľ:	Pavol Herda
Trvanie projektu:	1.1.2013 /
Evidenčné číslo projektu:	
Organizácia je koordinátorom projektu:	áno
Koordinátor:	Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	0
Čerpané financie:	Úrad SAV: 3000 €

Dosiahnuté výsledky:

V roku 2016 boli v systéme uskutočnené zmeny na základe zlučovania organizácii SAV (migrácia databáz ELVYS dotknutých organizácií, programátorské zmeny v systéme), zapracovaná bola nová osnova VYS podľa požiadaviek P SAV. Počas roka prebiehala hot-line podpora pre všetkých pracovníkov SAV. Uskutočnilo sa viacero školení a konzultácií v organizáciách SAV.

5.) WEBSAV (WEBSAV)

Zodpovedný riešiteľ:	Pavol Herda
Trvanie projektu:	1.1.2013 /
Evidenčné číslo projektu:	
Organizácia je koordinátorom projektu:	áno
Koordinátor:	Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	0
Čerpané financie:	Úrad SAV: 7500 €

Dosiahnuté výsledky:

Na portáli WEBSAV sa uskutočnilo množstvo programátorských zmien, či už súvisiacich so zlučovaním organizácii SAV, z pohľadu bezpečnosti a neposlednej rade prípravou responzívneho dizajnu pre mobilné zariadenia, ktorá ešte prejde rozsiahlou zmenou nasledujúci rok.

Počas roka prebehla celkovou úpravou vrátane grafického dizajnu a obsahovej štruktúry webový portál Spravy.sav.sk. Dizajn stránok bol zmenený podľa moderných požiadaviek, kde boli pridané aj nové funkcionality stránky. Pridali sme grafickú upútavku na nové číslo, pribudla možnosť on-line prezerania vydaní priamo v prehliadači pomocou prezerateľnej funkcie ako aj úryvky z najnovšieho čísla.

6.) Inovácia SAN prostredia (*SAN environment innovation*)

Zodpovedný riešiteľ: Michal Kadúc
Trvanie projektu: 1.1.2016 / 31.12.2016
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Čerpané financie: Úrad SAV: 12500 €

Dosiahnuté výsledky:

V rámci projektu boli zakúpené nové optické prepínače a sieťové prepínače, ktoré budú slúžiť na rýchlejšie prepojenie centrálnych serverov a diskových polí.

Programy: Iné projekty

7.) SANET do škôl (*SANET into Schools*)

Zodpovedný riešiteľ: Tomáš Lacko
Trvanie projektu: 1.4.2007 /
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: SANET
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Čerpané financie:

Dosiahnuté výsledky:

V projekte SANET do škôl boli v roku 2016 úspešne pripojené školy v Senci. Finančne sa na projekte podieľal SANET. Výpočtové stredisko SAV bolo koordinátorom prác.

Príloha C

Publikačná činnosť organizácie (generovaná z ARL)

Ohlasy (citácie):

ADCA Vedecké práce v zahraničných karentovaných časopisoch – impaktovaných

ADCA01 J. Bostrom, M. Pitonak, F. Aquilante, P. Neogady, T. B. Pedersen, R. Lindh; Coupled cluster and Moller-Plesset perturbation theory calculations of noncovalent intermolecular interactions using density fitting with auxiliary basis sets from Cholesky decompositions, *J. Chem. Theory Comput.* 8, 1921-1928, (2012).

[1.1] Bozkaya, U. - Sherrill, C.D. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 17, 2016, 174103

[1.1] Dutta, A.K. - Neese, F. - Izsak, R. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 3, 2016, 034102

ADCA02 J. Granatier, M. Pitonak, P. Hobza; Accuracy of several wave function and density functional theory methods for description of noncovalent interaction of saturated and unsaturated hydrocarbon dimers, *J. Chem. Theory Comput.* 8, 2282-2292, (2012).

[1.1] 2016 Mardirossian, N. - Head-Gordon, M. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 9, 2016, 4303-4325

[1.1] 2016 Mardirossian, N. - Head-Gordon, M. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 21, 2016, 214110

[1.1] 2016 Beran, G.J.O. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5567-5613

[1.1] 2016 Skelton, A.A. - Khedkar, V.M. - Fried, J.R. *Journal of Biomolecular Structure & Dynamics*, Vol. 34, No. 3, 2016, 529-539

[1.1] 2016 Cervinka, C. - Fulem, M. - Ruzicka, K. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 6, 2016, 064505

[1.1] 2015 Moller, K.H. - Hansen, A.S. - Kjaergaard, H.G. *Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 119, No. 44, 2015, 10988-10998

ADCA03 R. Sedlak, K. E. Riley, J. Rezac, M. Pitonak, P. Hobza; MP2.5 and MP2.X: Approaching CCSD(T) quality description of noncovalent interaction at the cost of a single CCSD iteration, *Chemphyschem* 14, 698-707 (2013).

[1.1] 2016 Schneider, W.B. - Bistoni, G. - Sparta, M. - Saitow, M. - Riplinger, C. - Auer, A.A. - Neese, F. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 10, 2016, 4778-4792

[1.1] 2016 Brauer, B. - Kesharwani, M.K. - Kozuch, S. - Martin, J.M.L. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 31, 2016, 20905-20925

[1.1] 2016 Sieranski, T. *Structural Chemistry*, Vol. 27, No. 4, 2016, 1107-1120

[1.1] 2016 Gao, T. - Li, H.Z. - Li, W.Z. - Li, L. - Fang, C. - Li, H. - Hu, L.H. - Lu, Y.H. - Su, Z.M. *Journal of Cheminformatics*, Vol. 8, 2016, 24

[1.1] 2016 Beran, G.J.O. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5567-5613

- [1.1] 2016 Liu, F. - Du, L.K. - Zhang, D.J. - Gao, J. *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 116, No. 9, 2016, 710-717
[1.1] 2016 Fominykh, O.D. - Sharipova, A.V. - Balakina, M.Y. *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 116, No. 2, 2016, 103-112

ADCA04

R. Sedlak, T. Janowski, M. Pitonak, J. Rezac, P. Pulay, P. Hobza; Accuracy of quantum chemical methods for large noncovalent complexes, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 3364-3374 (2013).

- [1.1] 2016 Nagy, P.R. - Samu, G. - Kallay, M. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 10, 2016, 4897-4914
[1.1] 2016 Brandenburg, J.G. - Bates, J.E. - Sun, J. - Perdew, J.P. *Physical Review B*, Vol. 94, No. 11, 2016, 115144
[1.1] 2016 Silva, N.J. - Machado, F.B.C. - Lischka, H. - Aquino, A.J.A. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 32, 2016, 22300-22310
[1.1] 2016 Mao, Y.Z. - Horn, P.R. - Mardirossian, N. - Head-Gordon, T. - Skylaris, C.K. - Head-Gordon, M. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 145, No. 4, 2016, 044109
[1.1] 2016 Yilmazer, N.D. - Korth, M. *Current Medicinal Chemistry*, Vol. 23, No. 20, 2016, 2101-2111
[1.1] 2016 Yu, F. - Fu, L.X. *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 116, No. 15, 2016, 1166-1172
[1.1] 2016 Otero-de-la-Roza, A. - DiLabio, G.A. - Johnson, E.R. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 7, 2016, 3160-3175
[1.1] 2016 Goel, H. - Butler, C.L. - Windom, Z.W. - Rai, N. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 7, 2016, 3295-3304
[1.1] 2016 Venkataramanan, N.S. *Journal of Molecular Modeling*, Vol. 22, No. 7, 2016, 151
[1.1] 2016 Yilmazer, N.D. - Korth, M. *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 17, No. 5, 2016, 742
[1.1] 2016 Brandenburg, J.G. - Caldeweyher, E. - Grimme, S. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 23, 2016, 15519-15523
[1.1] 2016 Cernusak, I. - Urban, M. - Kello, V. - Noga, J. *Chemicke Listy*, Vol. 110, No. 5, 2016, 376-384
[1.1] 2016 Grimme, S. - Hansen, A. - Brandenburg, J.G. - Bannwarth, C. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5105-5154
[1.1] 2016 Christensen, A.S. - Kubar, T. - Cui, Q. - Elstner, M. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5301-5337
[1.1] 2016 Beran, G.J.O. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5567-5613
[1.1] 2016 Frey, J.A. - Holzer, C. - Klopper, W. - Leutwyler, S. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5614-5641
[1.1] 2016 Sure, R. - Brandenburg, J.G. - Grimme, S. *ChemistryOpen*, Vol. 5, No. 2, 2016, 94-109
[1.1] 2016 Pavosevic, F. - Pinski, P. - Riplinger, C. - Neese, F. - Valeev, E.F. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 14, 2016, 144109
[1.1] 2016 Muhlbach, A.H. - Vaucher, A.C. - Reiher, M. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 3, 2016, 1228-1235
[1.1] 2015 Yilmazer, N.D. - Korth, M. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, Vol. 13, 2015, 169-175
[1.1] 2015 Yourdkhani, S. - Korona, T. - Hadipour, N.L. *Journal of Computational Chemistry*, Vol. 36, No. 32, 2015, 2412-2428

GII Rôzne publikácie a dokumenty, ktoré nemožno zaradiť do žiadnej z predchádzajúcich kategórií

BARKA, Ivan - BETÁK, Juraj - BUCHA, Tomáš - CEBECAUER, Tomáš - FERANEC, Ján - HAGUE IGONDOVÁ, Miroslava - HEFTY, Ján - HERDA, Pavol - HLAVÁČ, T. - HUSÁRIK, Marek - JANÁK, Juraj - KAŇÁK, Ján - KUDELA, Karel - MIŠKOVÁ, Monika - NOVÁČEK, Jozef - NOVÁKOVÁ, Martina - SVIČEK, Michal - SVOREŇ, Ján - ŠÚRI, Marcel - TAKÁČ, Jozef. Meniace sa Slovensko očami satelitov [elektronický zdroj]. Editor Ján Feranec. Bratislava : Veda, 2012. DVD + 72 s. textová časť. Názov z DVD. Požaduje sa Adobe Flash Player. ISBN 978-80-224-1285-8.

Citácie:

1. [1.1] ZONCOVA, M. - DUBCOVA, A. *Using an "INTERSECT" tool in ARCGIS for analysis of changes in the secondary landscape structure of Podhajska municipality. In MENDELNET 2015. 2015, p. 330-335., WOS*

Príloha D

Údaje o pedagogickej činnosti organizácie

Semestrálne prednášky:

doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.

Názov semestr. predmetu: Pokročilá numerická matematika a programovanie

Počet hodín za semester: 48

Názov katedry a vysokej školy: Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta,
Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

Semestrálne cvičenia:

Semináre:

Terénne cvičenia:

Individuálne prednášky:

Príloha E**Medzinárodná mobilita organizácie****(A) Vyslanie vedeckých pracovníkov do zahraničia na základe dohôd:**

Krajina	D r u h d o h o d y					
	MAD, KD, VTS		Medziústavná		Ostatné	
	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní
Počet vyslaní spolu						

(B) Prijatie vedeckých pracovníkov zo zahraničia na základe dohôd:

Krajina	D r u h d o h o d y					
	MAD, KD, VTS		Medziústavná		Ostatné	
	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní
Počet prijatí spolu						

(C) Účast' pracovníkov pracoviska na konferenciách v zahraničí (nezahrnutých v "A"):

Krajina	Názov konferencie	Meno pracovníka	Počet dní
Spolu			

Vysvetlivky: MAD - medziakademické dohody, KD - kultúrne dohody, VTS - vedecko-technická spolupráca v rámci vládnych dohôd

Skratky použité v tabuľke C: