

## Odůvodnění použití jednacního řízení bez uveřejnění

Identifikační údaje	
Číslo projektu	CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001791
Název projektu	IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale
Název zadavatele	Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava
IČ zadavatele	61989100
Název veřejné zakázky	Chemie a fyzika
Název zadávacího řízení (části veřejné zakázky)	<b>Programový balík CST Studio</b>
Evidenční číslo veřejné zakázky ve VVZ	-
Důvod použití jednacního řízení bez uveřejnění	§ 63 odst. 3, písm. b) Zákona č. 134/2016 Sb., o zadávání veřejných zakázek ve znění pozdějších předpisů (dále jen „zákon“)
Předpokládaná hodnota veřejné zakázky	1.972.080 Kč bez DPH
Dodavatel	TransTech Electronic, s.r.o.

### Prokázání potřeby pořízení konkrétního plnění pro splnění cílů projektu

V současnosti je modelování v rámci Výzkumného programu VP1 Modelování fotonických a spin-fotonických struktur realizováno zejména pomocí softwaru Comsol a Matlab s využitím vlastního implementovaného kódu na bázi metody vázaných módu (Rigorous Coupled Wave Algorithm – RCWA) pro modelování periodických systémů se základní geometrií doplněného o optimalizaci parametrů systému a fitování experimentálních dat. Existující software představuje výrazná omezení na potřebu řešit zejména rozsáhlé 3D úlohy a problémy se speciální geometrií, obecnými materiálovými parametry a kombinací modelování elektrických, optických a termálních charakteristik.

Pořízení SW balíku CST Studio Suite poslouží k modernizaci a rozvoji softwarového vybavení superpočítačové infrastruktury Národního superpočítačového centra IT4Innovations za účelem efektivního využívání kapacit nejmodernějších výpočetních technologií v oblasti fyziky, konkrétně 3D elektromagnetické simulace a modelování. Vzhledem k multidisciplinaritě a pořizované variantě licence CST Studio Suite bude software využitelný výpočetně-vědecky orientovanou komunitou uživatelů v rámci celé České republiky.

V rámci Výzkumného programu VP1 Modelování fotonických a spin-fotonických struktur bude software využíván k naplnění těchto výzkumných cílů:

VC1 Nové terahertzové zdroje – modelování blízkého a dalekého pole generovaného spintronickým terahertzovým zdrojem. Tato úloha vyžaduje zejména modely v široké spektrální oblasti, což je základní výhoda nového studovaného zdroje (pásmo 0.01-30 THz), započtení materiálů popsaných komplexními tenzory permitivity, včetně započtení nelinearit a povrchových jevů vyvolaných efektem spinových proudů. Výpočty vyžadují započtení efektů generace v tenkovrstevném systému mnoha vrstev různých materiálů o tloušťkách na úrovni nanometrů, transformace terahertzových vln difrakční strukturou a současně s šířením terahertzového záření z litograficky připravené struktury soustavou polarizační a zobrazovací optiky. Speciální úlohou je rovněž optimalizace tvaru struktury pro získání úplného systému terahertzových polarizačních stavů pro aplikace v terahertzové elipsometrii. Tento náročný výpočet vyžaduje efektivní paralelizaci softwaru s využitím grafických akceleratorů a velice nízkou úroveň numerického šumu vznikajícího při přepočtu diskretizační sítě. Pomocí softwaru CST Studio Suite bude možné řešit tyto náročné výpočetní úlohy a modelovat spintronické struktury.

VC2 Plasmonika a nereziproké fotonické struktury – v rámci tohoto cíle jsou požadavky na software zejména motivovány potřebou započtení magnetické modulační plasmonického jevu ve 3D fotonických strukturách. Vlastnosti polovodičů jsou modelovány tenzory komplexní permitivity a permeability s nelineárními efekty. Vlivem modulační materiálových vlastností optickým interferenčním polem vyžadují výpočty popis efektivního chování dvou nebo tří materiálů s rozdílnými parametry. Modelování je zejména motivováno aplikacemi nerezipročních optických součástek a senzorů. Díky balíku CST Studio Suite budeme provádět optimalizaci plasmonických a nereziprokých fotonických struktur a modelovat 3D rozložení optického pole ve struktuře.

VC3 Fotovoltaika a bezpečnostní difrakční struktury – modelování a simulace tohoto výzkumného cíle představuje typickou multidimensionální úlohu. V případě fotovoltaických struktur se jedná o modelování lokální nanostruktury (např. nanodrátky) v kombinaci se strukturovaným povrchem, nehomogenními elektromagnetickými vlastnostmi materiálů a interakce optických a elektrických vlastností určující výslednou účinnost solárního článku. V oblasti bezpečnostních holografických struktur modelování vyžaduje simulaci blízkého a dalekého optického pole (včetně polarizačních a barevných vjemů) od difragující struktury s jemným systémem pro modulaci optické fáze na bázi metamateriálů nebo plasmoniky. Navrhovaný software rovněž umožní fitovat měřenou optickou odezvu připravených hologramů. Pomocí softwaru CST Studio Suite bude simulována optická odezva od strukturovaného povrchu a modelovány absorpce v nanodrátcích s radiálním p-n přechodem.

VC4 Spinové lasery – při plnění tohoto cíle jsou na software kladeny požadavky již výše zmiňované (popis materiálů tenzorovými veličinami, nelineární efekty ve formě dynamických nelinearit laserového režimu, započtení spinových proudů a spinového čerpání, vliv periodických, aperiodických difrakčních struktur, započtení nehomogenit v zisku mnohonásobných kvantových jam a kvantových teček), které jsou doplněny velmi důležité modely technologických aspektů mechanického pnutí ve vrstvách, generované fotoelasticitě a anizotropii indukované sníženou symetrií a mechanickými jevy. Pro modelování spinových laserů bude využita flexibilita softwaru CST Studio pro řešení multiproblémů (šíření spinových proudů, efekty na rozhraních, vliv mechanického pnutí).

### **Unikátnost poptávaného softwarového řešení**

Předmětem veřejné zakázky je pořízení software pro infrastrukturu IT4Innovations pro 3D elektromagnetické simulace, konkrétně se jedná o pořízení licencí:

- 1 ks perpetuální licence CST Studio Suite včetně servisní údržby (maintenance) na dva roky
- 5 ks akceleračních tokenů (umožňujících paralelního výpočtu na 64 CPU zařízeních, nebo 16 GPU akceleračních zařízeních) včetně servisní údržby (maintenance) na dva roky

Základní vlastnosti Softwaru CST Studio Suite. Jedná se o komplexní software pro obecné použití pro 3D simulace elektromagnetického pole od statických úloh po optické frekvence. Umožňuje výpočty libovolné 3D geometrie s velmi přívětivým uživatelským rozhraním, simulace v časové nebo frekvenční doméně, využití multivrstvé Greenovy funkce pro MoM (metoda momentů) simulace, metoda konečných prvků FEM, mnohoúrovňové multipólové metody (MLFMM) a paprskové metody shooting boundary ray (SBR). Software umožňuje modelování ztrátových, nelineárních, obecně anizotropních (definice pomocí plných tenzorů) a nehomogenních materiálů. Umožňuje parametrizaci modelu, parametrické studie a optimalizaci, včetně paralelizace výpočtu a GPU akceleraci. Rovněž simulaci termálních (včetně vzdušného chlazení), mechanických a elektrických efektů. Umožňuje simulace obvodů (včetně S-maticových parametrů, AC analýzy, přenosové analýzy nelineárních komponent), simulaci efektů nelineárních komponent na rozložení pole ve 3D geometrii. Import a export často používaných 3D a 2D formátů (SAT, DXF, GDSII, STL, NASTRAN, STEP).

Přesto, že existuje celá řada softwarových balíčků umožňující do určité míry řešit tuto problematiku pouze software CST Studio Suite nabízí uživateli možnost využít následujících zcela unikátních funkcí:

- schopnost simulovat až 3 materiály v jedné hexagonální jednotce sítě
- možnost fixování hexagonální sítě při změnách geometrie pro snížení šumu ze změny síťování, možnost pohyblivých uzlů tetrahedrání sítí bez přesíťování (využívané při optimalizaci a parametrických studiích)
- možnost automaticky extrahovat širokodisperzní komplexní permitivitu nebo povrchovou impedanci z měřených S-maticových parametrů
- analýza charakteristických módů vyzařující strukturou
- metoda částice v buňce – electron flow
- dvousměrná vazba mezi rozsáhlou 3D strukturou v časové a frekvenční doméně
- matice filtrové vazby získaná pomocí S-parametrů

Z výše uvedených unikátních funkcí balíku CST Studio Suite jsou v rámci modelování fotonických a spin-fotonických struktur nepostradatelné zejména fixování sítě při změnách geometrie a výpočty s proměnnými parametry a optimalizační úlohy necitlivé k numerickému šumu. Dále bude využívána extrakce S-maticových parametrů a jejich porovnání s experimentem, studium vlastních módů rezonančních struktur. Simulace až tří materiálů v jedné buňce bude využívána pro aplikaci efektivního prostředí v plasmonice, spintronických terahertzových zdrojích a bezpečnostních difrakčních strukturách.

#### **Prokázání existence důvodů pro zadání veřejné zakázky v jednacím řízení bez uveřejnění**

Jak je uvedeno v předchozích částech tohoto odůvodnění, programový balík CST Studio Suite je jediný, který dokáže komplexně naplnit objektivní potřeby dané projektem v oblasti nelineárních úloh modelování spinfotonických struktur pro rozsáhlé 3D elektromagnetické simulace a naplnit tak cíle výzkumného programu 1. Očekávané výsledky plynoucí z využití softwaru CST Studio Suite jsou podrobně popsány v předcházející části tohoto zdůvodnění.

Výrobcem softwaru je společnost CST – Computer Simulation Technology GmbH, Bad Nauheimer Str. 19, 64289 Darmstadt, Germany. S ohledem na technickou výlučnost softwarového balíku a uplatňovaný obchodní model je jediným možným dodavatelem společnost TransTech Electronics s.r.o., IČ: 61065391, se sídlem Hněvkovská 58, 140 00 Praha 4, která je výhradním zástupcem výrobce softwaru na území České republiky.

Zadavatel jej oslovil výzvou k podání nabídky v rámci nadlimitní veřejné zakázky na dodávky v jednacím řízení bez uveřejnění v souladu s § 63 odst. 3 písm. b) zákona, jelikož z technických důvodů neexistuje hospodářská soutěž, tudíž nelze využít jiného postupu. Zadavatel nestanovil zadávací podmínky veřejné zakázky s cílem vyloučit hospodářskou soutěž.

Uvedený software je součástí skupiny softwarů „Chemie a fyzika“ pořizované v rámci projektu „IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale“, pro kterou byla na základě předchozí komunikace s poskytovatel dotace a skutečností uvedených v žádosti o podporu stanovena předpokládaná hodnota ve výši, která nepřekročí 6 000 000 Kč bez DPH a tím pádem zadání v nadlimitním režimu. Jednotlivé softwary jsou s ohledem na jejich jedinečnost soutěženy v rámci veřejné zakázky pod označením „Chemie a fyzika“ v souladu s § 18 odst. 2 zákona č. 134/2016 Sb., o zadávání veřejných zakázek, ve znění pozdějších předpisů jako části jedné veřejné zakázky formou samostatných zadávacích řízení.