

ROZDÍL MEZI SCI-FI A REALITOU BÝVÁ JEN NĚKOLIK JEDNOTEK AŽ DESÍTEK LET

Superpočítače pomáhají s koronavirem, termojadernou fúzí, předpovědi počasí a klimatických změn, plánováním chirurgických zákroků nebo optimalizací výrobních procesů v průmyslu. „Srdcem a zároveň mozkiem továrny budoucnosti bude superpočítač, který bude zpracovávat a analyzovat data ze všech kamer a senzorů a řídit chod celé továrny včetně vyhodnocování poruch a nutnosti údržby jednotlivých zařízení“, říká profesor Tomáš Kozubek, vědecký ředitel Národního superpočítačového centra IT4Innovations, které pracuje při VŠB – Technické univerzitě Ostrava.

**5G SÍŤE UMOŽNÍ
ZÍSKAT PODSTATNĚ
VĚTŠÍ MNOŽSTVÍ
DAT, KTERÉ MOHOU
SUPERPOČÍTAČE
ZPRACOVAT**

Pokud si budu chtít koupit procesor pro „domácí“ počítač, mohu si v e-shopu objednat 64 jádrový chip za přibližně 200 000 korun. Momentálně nejvýkonnější superpočítač v Národním superpočítačovém centru IT4Innovations disponuje 24 000 jádry. Platí tedy, že máte výkon procesorů přibližně pětisetnásobný než to nejlepší, co lze aktuálně získat na maloobchodním trhu?

Superpočítač je tvořen velkým množstvím vysoce výkonných procesorů, velkokapacitních pamětí a disků, vzájemně propojených ultrarychlou sítí s extrémně nízkou latencí. Propojení jednotlivých částí, jejichž spolupráce je řízena paralelními aplikacemi speciálně vyvinutými pro superpočítače, vytváří výpočetní sílu a kapacitu, která daleko převyšuje běžné počítače. Výkon superpočítačů, ale i jednotlivých procesorů a grafických akceleratorů lze vyjádřit v jednotkách Flop/s označující počet operací v plovoucí řádce za sekundu. Pokud si tedy vezmeme např. jeden z nejvýkonnějších procesorů současnosti AMD Rome Epyc s výkonem 2,15 TFlops/s a výkon superpočítače Salomon 1,46 PFlop/s (v obou případech měřeno benchmarkem Linpack), pak rozdíl bude zhruba sedmisetnásobný.

Na webových stránkách uvádíte „Naše superpočítače pomáhají vědě, průmyslu a společnosti“. Jak superpočítače pomáhají průmyslu?

Superpočítače mají v průmyslu široké uplatnění. Využívají se všude tam, kde by to jinak bylo v podstatě nemožné, velmi nákladné nebo kde by klasické metody počítání trvaly velmi dlouhou dobu. Známým a v průmyslu velmi živým příkladem je technologie digitálních dvojčat, tedy vytvoření dokonalého digitálního (počítačového) modelu reálného

zařízení, například elektrického motoru, vodní turbíny nebo výrobní linky. Na modelu lze simulovat fungování či komunikaci mezi jeho dílčími částmi a pomáhá odhalit různé chyby a nesrovnalosti před uvedením zařízení do provozu i během jeho celého životního cyklu.

Kde jinde lze využívat superpočítače?

Superpočítače se dále uplatňují při návrhu nových materiálů i nových výrobků, vývoji léků, plánování chirurgických zákroků, předpovědi počasí a klimatických změn, optimalizaci výrobků i výrobních procesů nebo výzkumu termojaderné fúze. Uspadňují pochopení komplikovaných systémů a umožňují předpovědět jejich další vývoj. Mnoho velkých průmyslových podniků má své vlastní superpočítače, jmenujme například společnost Škoda Auto, která má superpočítač se srovnatelným výkonem našeho doposavad nejvýkonnějšího superpočítače Salomon. Protože se ale nejedná o levnou záležitost, využívá mnoho průmyslových podniků pro výpočty právě naše superpočítačové centrum. IT4Innovations je výzkumným centrem VŠB – Technické univerzity Ostrava a má statut digitálního inovačního hubu (DIHu) udíleného evropskou komisí. V rámci aktivit DIHu se snažíme napomáhat digitalizaci české společnosti. Specializujeme se na služby v oblasti vysoce výkonných výpočtů, počítačových simulací a modelování, pokročilých datových analýz, rozšířené a virtuální reality a umělé inteligence s aplikacemi ve strojírenství, energetice, krizovém řízení, farmaceutickém průmyslu, informačních technologiích či telekomunikacích.

Lze uvést konkrétní průmyslové aplikace v Česku, kdy jsou nasazeny superpočítače?

Již jsme zmínili společnost Škoda Auto, která využívá superpočítače k virtuálnímu designu a optimalizaci dílčích komponent vyráběných aut s využitím aerodynamických a aeroakustických simulací, crash testů, virtuální reality a podobně. Řada společností typu Seznam.cz využívá superpočítače ke zpracování a analýze rozsáhlého množství dat a efektivním aplikacím algoritmů umělé inteligence. S využitím odborníků a superpočítačové infrastruktury IT4Innovations se podařilo realizovat platformu pro zpracování a ukládání dat v oblasti vývoje městských zástaveb pro Evropskou

kosmickou agenturu, zvýšit účinnost vodních čerpadel pro firmu Sigma Group, optimalizovat chlazení elektromotoru firmy Siemens, vyvinout s firmou Borcad cz nové typy křesel pro vlakovou přepravu a také urychlit vývoj léčiv společně se společností Janssen Pharmaceuticals díky vylepšení využívaných algoritmů umělé inteligence. V současnosti superpočítače rovněž pomáhají při hledání léků proti koronaviru.

S jakými úlohami mimo průmysl si superpočítač poradí?

Je potřeba říci, že superpočítače v IT4Innovations slouží především k vědeckým účelům. Výpočetní čas poskytujeme výzkumným a akademickým pracovníkům z České republiky v rámci veřejné grantové soutěže zcela zdarma. Jejich projekty spadají nejčastěji do oblasti materiálových věd, biověd, astrofyziky, inženýrství a aplikované matematiky. Jen za loňský rok bylo mezi 190 projektů rozděleno 233 milionů jádrohodin.

Je náročná obsluha nebo softwarová příprava úkolů pro superpočítače?

Jsou firmy, jejichž týmy jsou schopné si úlohy připravit a spouštět zcela samy, častěji se ale setkáváme s tím, že podniky využívají odborné znalosti našich expertů pro komplexní řešení konkrétního problému. Nejčastějšími formami spolupráce jsou projekty smluvního nebo společného výzkumu. Žadosti sestavujeme společně a vkládáme do toho své know-how v této oblasti. Konkrétně jsme se podíleli na více než 100 projektech smluvního výzkumu. Formou pronájmu výpočetního času jsme v posledních třech letech rozdělili mezi 29 firemních projektů přes 10 milionů jádrohodin. V rámci společného výzkumu spolupracujeme s podniky na více než 40 mezinárodních (programy H2020, Interreg) a národních (programy TA ČR, MPO, MŠMT, MV, regionální) projektech.

Pokud chce podnik využít výpočetního výkonu vašich počítačů, jakým způsobem jsou přidělovány sloty pro výpočetní úlohy?

Firmám nabízíme dvě varianty přístupu k našim výpočetním prostředkům. První z nich je alokace sjednaná na určité období s předem dohodnutou kvótou. Jedná se o pronájem v podobě sdíleného přístupu s jinými uživateli s předem dohodnutým celkovým počtem jádrohodin a standardní uživatelskou podporou. Druhou možností je alokace přizpůsobená zákazníkovi „na míru“, což v praxi znamená výhradní možnost využití předem sjednaného počtu výpočetních uzlů v předem určeném období, která umožňuje okamžitý s nízkým nesdílený přístup k výpočetním kapacitám.

Z jakých oborů a odvětví přicházejí požadavky na výpočetní výkon superpočítačů?

Společnosti, které často využívají naše služby ve formě pronájmu nebo smluvního výzkumu, spadají do oblasti strojírenství. Týká se to kupříkladu optimalizace chlazení při výrobě hliníkových profilů, zvýšení účinnosti čerpadel a turbín, optimalizace materiálu i tvaru teplotních senzorů či vývoje vlakových sedadel. Dále pak do kategorie informačních technologií jako například řízení skladových zásob, vývoj chytrých platforem pro masivně paralelní zpracování dat ze sekvenátorů DNA nebo zpracování dat z družicových snímků. Dále spolupracujeme s firmami z oblasti zdravotnictví, geologie, geodézie, ale i z oblasti životního prostředí. Zde jmenujme například vývoj služby pro oblast krizového řízení Floreon (floreon.eu), vývoj metod pro přesné vyhodnocení vertikálních pohybů pomocí interferometrie, vývoj nástrojů pro vzdálené renderování na superpočítačích a tvorbu 3D modelů ze snímků CT a magnetické rezonance.

V počítačovém světě je dobře znám takzvaný Moorův zákon. Platí také pro superpočítače?

Jednoznačně ano. Superpočítače zastarávají stejně jako jakékoliv jiné technologie. Ideální čas na jejich obnovu je po čtyřech až pěti letech. Po tomto čase již jejich provoz začíná být nerentabilní – to znamená, že náklady na provoz se blíží řádově pořízení nového systému se srovnatelným výkonem. V našem superpočítačovém centru máme stanoven plán obnovy systémů. V minulém roce jsme

upgradovali náš první superpočítač Anselm pořízením superpočítače Barbora s výkonem 849 TFlop/s a zprovoznil jsme také specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence Nvidia DGX-2. V současné době je podepsána smlouva na pořízení EuroHPC petascalového systému, který bude mít špičkový výkon 15,2 PFlop/s a který bude našim uživatelům i z řad průmyslových partnerů sloužit od poloviny roku 2021. Odhadujeme, že tento superpočítač v době uvedení do provozu bude patřit mezi 10 největších superpočítačů v Evropě a současně bude v prvních 50 na světě (pořadí superpočítačů je dáno žebříčkem top500.org). Je nutné si uvědomit, že investicemi do těchto technologií přinášíme české společnosti a průmyslu vysoký inovační potenciál. V tomto ohledu jsem rád, že Česká republika nikterak nezaostává za vyspělými evropskými zeměmi.

Něco jste už naznačil, ale můžete více vysvětlit, jak souvisejí superpočítače se strojovým učením nebo umělou inteligencí?

Naše výzkumné týmy se intenzivně zabývají vývojem algoritmů umělé inteligence a jejich aplikací v různých průmyslových odvětvích, ale i ve vědě a společnosti. Využití superpočítačů je zásadní například při zpracování rozsáhlých trénovacích datových sad. Nový výpočetní systém, který bude v našem centru zprovozněn v příštím roce, bude tvořen mimo jiné silně akcelerovanou částí využívající 560 nejvýkonnějších grafických karet Nvidia A100 Tensor Core o celkovém teoretickém špičkovém výkonu až 175 PFlop/s pro výpočty umělé inteligence. Superpočítač bude propojen technologií Nvidia Mellanox HDR 200Gb/s InfiniBand, která se vyznačuje extrémně nízkou latencí a chytrými akcelerátory pro výpočty v síti. Díky této výbavě bude nový superpočítač perfektně připraven řešit i ty nejnáročnější úlohy z oblasti strojového učení a umělé inteligence, což je směr, kterým se aktuálně celosvětový výzkum a vývoj ubírá. Tuzemské výzkumné týmy a podniky tak budou mít přístup k této unikátní technologii. V IT4Innovations máme hned několik projektů na vývoj a aplikaci algoritmů umělé inteligence. Za všechny bych jmenoval spolupráci na detekci onemocnění pomocí fotek sítnice či projekt ExCAPE, ve kterém je strojové učení s využitím superpočítačové infrastruktury použito pro efektivní predikci vlastností různých chemických sloučenin.

„POKROK
V KVANTOVÝCH
TECHNOLOGIÍCH
JE OBROVSKÝ
A ŘADA ODBORNÍKŮ SE SHODUJE,
ŽE DO 10 LET BUDE VŠE JINAK.“

Superpočítače dokáží pracovat s obrovským množstvím dat získaných například prostřednictvím takzvaného internetu věcí. Postačují k získávání a analýze současné datové sítě, nebo pro další rozvoj je nezbytností zavedení 5G infrastruktury?

Superpočítače jsou připojeny k internetu nebo dalším vědecko-výzkumným sítím pomocí optických kabelů s rychlostí několika stovek gigabitů za vteřinu. Z hlediska jejich rychlosti připojení se s příchodem 5G sítí nic nemění. 5G síť však umožní sesbírat podstatně větší množství dat za jednotku času, protože oproti současným sítím mají výhodu v tom, že dokáží připojit řádově větší množství malých a levných koncových zařízení, tedy zdrojů dat. Současně nabídnou vyšší přenosové rychlosti a nízkou latenci. 5G síť nám tedy umožní získat podstatně větší množství dat, které mohou superpočítače zpracovat.

Přeneseme-li se o několik desetiletí do budoucnosti, jak budou podle vás vypadat továrny budoucnosti a jakou roli v jejich fungování budou hrát superpočítače, pokročilé datové analýzy a vysoce výkonné počítání?

Továrna budoucnosti bude plně digitalizovaná a automatizovaná, a časem i zřejmě zcela bez lidského personálu, jak vidáme v mnoha sci-fi filmech, přičemž rozdíl mezi sci-fi a realitou bývá často jen několik jednotek až desítek let. Srdcem a zároveň mozkem továrny budoucnosti bude superpočítač, který bude zpracovávat a analyzovat data ze všech kamer a senzorů a řídit chod celé továrny včetně vyhodnocování poruch a nutnosti údržby jednotlivých zařízení. Základní výbavou personálu, jehož kapacita i kvalifikace se bude postupně snižovat, se stanou speciální brýle s rozšířenou realitou, skrz které jim budou moci experti na druhém konci světa poskytovat odborné rady. Výrobní linky budou mít schopnost se ve zlomku času přenastavit k výrobě nových produktů. Na základě nepřetržité analýzy veškerých dat z provozu továrny a z výroby pak manažeři mohou rozhodovat o investicích nebo třeba i o odstavení či upgradu jednotlivých zařízení.

OD POLOVINY ROKU 2021 BUDE UŽIVATELŮM I Z ŘAD PRŮMYSLOVÝCH PARTNERŮ SLOUŽIT EUROHPC PETASCALOVÝ SYSTÉM, KTERÝ BUDE MÍT ŠPIČKOVÝ VÝKON 15,2 PFLOP/S. BUDE PATŘIT MEZI 10 NEJVÝKONNĚJŠÍCH SUPERPOČÍTAČŮ EVROPY

BUDOUCÍ VÝROBNÍ LINKY BUDOU MÍT SCHOPNOST SE VE ZLOMKU ČASU PŘENASTAVIT I K VÝROBĚ NOVÝCH PRODUKTŮ

Bude v těchto továrnách místo pro někoho jiného než softwarové inženýry? A bude vůbec místo pro ně, pokud řízení zastane vysoká umělá inteligence?

K rozvoji továren budoucnosti je zapotřebí velké množství kvalifikovaných odborníků v oblasti digitalizace a automatizace. K tomuto účelu je nutné zaměřit vzdělávací systém k výchově podstatně většího množství nových absolventů a k rekvalifikaci stávajících. Na druhou stranu, jak už jsem zmínil, samotný personál továren budoucnosti nebude muset být tvořen kvalifikovanými odborníky, i tento personál bude postupně nahrazen onou zmiňovanou vysokou umělou inteligencí.

Současné superpočítače jsou fantasticky výkonné. Nicméně velké globální společnosti, které potřebují obrovský výpočetní výkon, se poohlížejí po kvantových počítačích. Jaký je v tomto směru aktuální vývoj?

Kvantové počítání a kvantové počítače jsou slibný koncept pro provádění výpočtů a řešení specifických komplexních výpočetních úloh s využitím zákonů kvantové mechaniky. Kvantové počítače a počítání však prozatím zůstávají především konceptem a specifickou oblastí výzkumu v aplikované fyzice bez přímého praktického uplatnění. Kvantové počítače dnes nabízejí například společnosti **D-Wave** a **IBM** a na jejich vývoji pracuje několik dalších společností, mezi nimi i **Intel** a **Google**. Prakticky využitelné produkty však prozatím chybějí.

Způsob práce kvantových počítačů je zásadně odlišný od těch současných. V čem spočívá největší potíž?

Jedním z hlavních problémů dnešních kvantových počítačů je, že jsou stále příliš zatíženy šumem a kvantové výpočetní technika odolná proti chybám je stále poněkud vzdáleným snem. Prozatím nebyl demonstrován žádný velký škálovatelný kvantový hardware ani komerčně užitečný algoritmus. Obecně také chybí softwarové zázemí pro kvantové počítání. Kvantové počítání je dnes stále převážně ve stadiu přípravy, kdy budoucí kvantové algoritmy a programy je možné plánovat a simulovat s pomocí klasických počítačů a vhodného softwarového vybavení. Avšak bez jakékoli výhody oproti využití klasických počítačů a algoritmů. Nicméně pokrok v kvantových technologiích je obrovský a řada odborníků se shoduje, že do deseti let bude vše jinak, takže se nechme překvapit. (jk)



PROF. TOMÁŠ KOZUBEK

V současnosti je vědeckým ředitelem Národního superpočítačového centra IT4Innovations při VSB – Technické univerzitě Ostrava. S touto akademickou institucí je spojena i jeho další a předchozí vědecká kariéra. Od roku 2019 zde učí počítačové modelování komplexních jevů v mechanice a působí jako vedoucí Useku výzkumu a vývoje. Věnuje se také oblasti aplikované matematiky.

