

## KOMENTÁŘ VÍTA VONDRÁKA, ŘEDITELE IT4INNOVATIONS

### Superpočítače: k čemu slouží a jak rychle stárnou?

Ostrava, 19. prosince 2017

Vážení čtenáři,

vzhledem ke krátké diskuzi ohledně ostravského superpočítače, která proběhla 5. prosince na půdě Parlamentu České republiky při 3. jednání poslanecké sněmovny a kterou otevřel pan poslanec Ivan Pilný, jsem se coby ředitel IT4Innovations národního superpočítačového centra rozhodl napsat tento komentář. Rád bych uvedl některé zmíněné skutečnosti na pravou míru. Mám totiž za to, že by veřejnost měla znát skutečný význam superpočítačů ve společnosti obecně, čili nejen toho, který provozujeme v Ostravě pro Českou republiku.

### **Co považujeme za superpočítač?**

Pokud mluvíme o počítačích, superpočítačích a HPC (High Performance Computing), je nutné si nejprve tyto pojmy vyjasnit. Pokud byste se podívali na Wikipedii, tak za superpočítač zde považují *velmi výkonný počítač, v poslední době nejčastěji ve formě počítačového clusteru, tedy spojení mnoha běžných počítačů dohromady, a to obvykle speciální vysokorychlostní sítě*. Jakkoli bychom takovou definici mohli považovat za docela vágní, popisuje superpočítač poměrně přesně. V této definici je totiž skryta řada dalších vlastností superpočítačů. Zejména to, že hlavním účelem superpočítače mají být výpočty vyžadující nadstandardní výpočetní výkon, který nedostanete z vašeho běžného osobního počítače ani z pracovní stanice. Navíc obvykle neslouží jen jedinému uživateli, ale jeho výpočetní výkon je sdílen více uživateli tak, aby byl efektivně využíván. Přesto všechno existují superpočítače menší a větší.

Od roku 1993 se 2x ročně vyhlašuje 500 nejvýkonnějších počítačů světa, které pak můžete nalézt v žebříčku, který zveřejňuje top500.org. Provozovatelé superpočítačů však své výpočetní systémy přihlašují do této "soutěže" zcela dobrovolně, a proto tam nemusíte nalézt úplně všechny. Zejména zde nenajdete superpočítače, které plní nějaké státní strategické či bezpečnostní úkoly, a také zájem některých soukromých společností zveřejňovat podrobné informace o svých výpočetních kapacitách není příliš velký. Bezesporu však můžeme tvrdit, že počítače zveřejněné na tomto žebříčku patří mezi nejvýkonnější superpočítače světa. Vzhledem k rychle narůstajícímu počtu superpočítačů ve světě se však řada z nich i přes svůj nezanedbatelný výkon mezi 500 nejvýkonnějších nedostane. Žebříček aktuálně vedou dva čínské superpočítače Sunway TaihuLight a Tianhe-2 následovány švýcarským superpočítačem Piz Daint. Nejvýkonnější superpočítač USA Titan je na 5. příčce.

Velmi často se v souvislosti se superpočítači mluví i o tzv. HPC, anglicky High Performance Computing. Český ekvivalent by byl asi vysokovýkonnostní výpočty. Jedná se o mezioborovou disciplínu, jejímž předmětem je výzkum, vývoj a využití výpočetních metod, nástrojů a

technologií k řešení výpočetně náročných problémů z teorie i praxe. Přirozeně jsou tak superpočítače velmi důležitým nástrojem HPC, a proto jsou mnohdy tyto oblasti i ztotožňovány, byť HPC je mnohem obecnější pojem zahrnující i výzkum a vývoj primárně nevyužívající superpočítačových technologií.

## K čemu superpočítače slouží a kdo je používá?

Využití superpočítačů a HPC obecně ve světě významně roste a není již pouze doménou úzkého okruhu lidí v bílých pláštích pohybujících se po klimatizovaném sále. V podstatě každá univerzita dnes vlastní menší či větší superpočítač, a pokud ne, má k němu alespoň zajištěn přístup. Přístup k superpočítačům tak mají studenti, výzkumní pracovníci, ale i odborníci z praxe, neboť superpočítače si pro své potřeby pořizují i neveřejné výzkumné, vývojové a komerční instituce.

Superpočítače dnes nachází široké uplatnění v řadě disciplín. Předpovědi počasí jsou výsledkem náročných superpočítačových simulací. Superpočítače se využívají k rozsáhlým datovým analýzám či ve virtuálním designu a prototypingu, například při vývoji letadel, automobilů, nových materiálů apod. Možná málokoho však napadne, že na počátku bílé tabletky vyzvednuté v lékárně stojí velmi náročné superpočítačové simulace, že za řadou důležitých fyzikálních objevů stojí ověřování hypotéz prostřednictvím superpočítačových simulací nebo že 3D mapy na vašich mobilních telefonech zpracoval superpočítač.

Obecně platí, že superpočítačové simulace nahrazují experimenty, neboť jsou rychlejší, levnější a bezpečnější. Navíc umožňují simulovat jevy, které ani nelze realizovat experimentálně a umožňují tak vidět "věci", o kterých bychom nevěděli. Nikoho asi nenapadne pochybovat o významu mikroskopu, který otevřel vědcům možnost vidět svět pouhým okem neviditelný. Jako analogie se zde nabízí superpočítač. Jeho možnosti jsou však mnohem větší, neboť dokáže "přiblížit" i jevy, které teprve nastanou.

## Kdo superpočítače pořizuje a provozuje?

V podstatě lze říci, že každá vyspělá země provozuje alespoň jeden superpočítač, který se zařadí do žebříčku top500.org. Pochopitelně čím vyspělejší země, tím jich provozuje více a jejich výkon je větší. V současnosti je více než 50 % výpočetního výkonu superpočítačů soustředěno v Asii, z toho více než 35 % v Číně, téměř 30 % v Americe (zejména v USA) a méně než 20 % v Evropě. Evropa, vědoma si významného poklesu podílu výpočetních kapacit (ještě v roce 2010 byla za USA druhým kontinentem s největším výpočetním výkonem), výrazně zintenzivnila podporu HPC ve vědě i průmyslu a v rámci iniciativy EuroHPC se snaží vybudovat zcela vlastní superpočítač, který by patřil mezi nejvýkonnější na světě. Za tímto účelem vzniká konsorcium jednotlivých členských států, které na vývoj takového systému budou přispívat jak finančně, tak i svou odborností.

Jelikož pořízení a provoz těch největších superpočítačů je velice nákladný a poptávka po jejich využití je poměrně vysoká, přístup k nim dostávají pouze uživatelé, kteří je dokážou velmi

efektivně využít. Za tímto účelem si jednotlivé země budují i menší superpočítačová centra, která buď plně pokryjí požadavky svých uživatelů, nebo jim umožní přípravu svých programových kódů pro efektivní využití největších systémů světa. V Evropě se takto buduje celý HPC ekosystém, který zahrnuje nejmenší superpočítačová centra na univerzitní či regionální úrovni, tzv. Tier-2 systémy, národní superpočítačová centra, tzv. Tier-1 systémy, a největší nadnárodní superpočítače, tzv. Tier-0. Roli národního Tier-1 centra v České republice hraje IT4Innovations národní superpočítačové centrum v Ostravě. Pokud bychom chtěli srovnat výpočetní výkon jeho nejvýkonnějšího superpočítače Salomon s ostatními srovnatelně velkými zeměmi v Evropě, pak Česká republika patří spíše k průměru, neboť její výpočetní výkon v přepočtu na osobu dělá přibližně 191,6 MFlop/s (milióny operací v pohyblivé řádové čárce). Srovnatelně si na tom stojí např. Rakousko (196,6 MFlop/s) nebo Polsko (186,2 MFlop/s). Přepočteným výkonem větším než 400 MFlop/s na obyvatele se může pyšnit např. Holandsko, Finsko nebo Švédsko, které přesahuje i hranici 650 MFlop/s. Dominantou Evropy je Švýcarsko, které disponuje výkonem 3334,3 MFlop/s na jednoho obyvatele.

Pokud tedy chceme, aby česká věda a průmysl nezaostávaly za svým evropským okolím, je třeba, aby Česká republika do HPC technologií investovala přinejmenším to, co investují zmíněné země. Tato investice je totiž strategickou investicí do budoucnosti a konkurenceschopnosti České republiky na Evropské i celosvětové úrovni.

Země	Počet obyvatel [M]	Rpeak 2017 [TFlop/s]	Per capita [MFlop/s]
Česká republika	10,5	2011,6	191,6
Finsko	5,5	2678,5	487,0
Holandsko	16,9	6764,5	400,3
Polsko	38,0	7075,6	186,2
Rakousko	8,5	1670,8	196,6
Švédsko	9,8	6445,7	657,7
Švýcarsko	8,3	27674,7	3334,3

## Jak rychle počítače stárnou?

Superpočítače, stejně jako všechny výpočetní technologie, podléhají zastarávání. Morální životnost superpočítačů není vyšší než životnost běžných počítačů a elektronických zařízení (kupříkladu mobilních telefonů), tedy přibližně 4-5 let. Toto je fakt, se kterým se potýká každý z nás, kdo si pořizuje počítač. Při koupi vašeho osobního počítače či mobilního telefonu však asi nehraje nejdůležitější roli, jestli bude za rok nebo za dva zastaralý. Určitě bude. Budou novější modely. Hlavním důvodem pro jeho pořízení je, zdali ho potřebujete a jak ho využijete.

Ne jinak je tomu i u superpočítačů. Vzhledem k jejich vyšší pořizovací hodnotě a nákladům na provoz je třeba zajistit, aby byly velmi efektivně využívány tak, aby za dobu své životnosti co nejlépe dostály svému účelu, pro který byly pořízeny. Navíc je třeba zajistit jejich pravidelnou obměnu, aby jejich uživatelé po uplynutí jejich morální životnosti měli stále přístup k plnohodnotnému nástroji pro svůj výzkum. Za posledních 5 měsíců bylo ve světě instalováno 137 zcela nových superpočítačů, které se umístily v top500.org. V Evropě jich bylo celkem 10.

Obecně se pro stárnutí superpočítačů dá použít tzv. Mooreův zákon, který tvrdí, že výkon počítačů se za dva roky přibližně zdvojnásobí. Například ostravský superpočítač Salomon se umístil v roce pořízení 2015 na 40. místě v top500.org s výkonem přibližně 2 PFlop/s (2012 biliónů operací v pohyblivé řádové čárce za sekundu). O dva roky později se na témže 40. místě umístil německý SuperMUC s výkonem 3,2 PFlop/s a na 38. místě superpočítač z DKRZ – Deutsches Klimarechenzentrum s výkonem 3,963 PFlop/s. Tento fakt platí dlouhodobě a v podstatě se žádné zázraky nekonají. Proto není možné, aby se výkon celého superpočítače za 7 let vměstnal do jednoho čipu. To se děje v časovém horizontu kolem 18 let. Např. americký superpočítač ASCI Red z roku 1997 měl stejný výkon jako jeden koprocesor Intel XeonPhi instalovaný v ostravském superpočítači Salomon v roce 2015.

## Vyplatí se provozovat superpočítače?

Primární motivací pro rozsáhlou podporu HPC ve vyspělých zemích je obecně vysoká společenská i finanční návratnost takové investice. Studium návratnosti (Return of Investment, index ROI) investic do HPC se dlouhodobě zabývá konzultační společnost IDC na základě zadání Ministerstva energetiky Spojených států amerických (Department of energy, DOE). DOE přispívá na provoz a obnovu 4 z 10 nejvýkonnějších superpočítačů světa. V prosinci 2016 společnost IDC publikovala průběžné výsledky probíhající studie (IDC HPC ROI Research Update, December 2016), kde analyzuje 673 případů vědeckých inovací. Za pomoci makroekonomického modelu a tří inovačních indexů byla vypočtena návratnost ROI až 515 dolarů na dolar investovaný do HPC a 52 dolarů zisku. Jde o celospolečenskou návratnost investic vyčíslenou v makroekonomickém měřítku.

Skutečný přínos superpočítačů je však velmi těžké přesně vyčíslit, neboť jejich návratnost je v naprosté většině případů nepřímá a v čase posunutá. Například v oblasti vývoje nových léčiv nebo ve výzkumu spojeném s jadernými fúzí, kde se bez superpočítačů dnes neobejdeme, je návratnost finančně velmi složitě vyčíslitelná, a přitom není pochyb o socio-ekonomickém významu takového výzkumu.

Velké superpočítače se však rovněž instalují i v neveřejném sektoru. V leteckém, v automobilovém nebo ve farmaceutickém průmyslu naleznete řadu velkých superpočítačů. Na top500.org jsou na významných pozicích uvedeny i superpočítače významných petrolejářských společností: Total (21. místo), Eni (37. pozice) nebo Saudi Aramco (60. místo). Všechny tyto společnosti zřejmě svou investici do takto výkonných systémů pečlivě zvážily.

## Jak si na tom stojí ostravský superpočítač?

IT4Innovations národní superpočítačové centrum v Ostravě aktuálně provozuje 2 superpočítače. Superpočítač Anselm pořízený v roce 2013 a Salomon pořízený v roce 2015. Superpočítač Anselm přišel na 77 mil. Kč a větší Salomon na 273 mil. Kč. Veškeré další vybavení potřebné k provozu současných i budoucích superpočítačů včetně budovy s životností přes 40 let stálo necelých 450 mil. Kč. Všechny tyto investice byly po dlouhém procesu hodnocení v roce 2011 schváleny Evropskou komisí a financovány z evropských strukturálních fondů.

Superpočítač Salomon je ve stáří 3 let na vrcholu své produktivity a užitečnosti. Je 31. v Evropě a 87. ve světě. Za 3 roky sice spadl z 40. příčky o 47 pozic níže, ale po polském superpočítači Prometheus je stále nejvýkonnějším systémem ve střední a východní Evropě a stále disponuje koncepčně nejmodernějšími procesory Intel. V žádném případě tedy nemůžeme tvrdit, že by se jednalo o zastaralý superpočítač, což dokládá i stále se zvyšující zájem o jeho služby. V poslední výzvě na žádosti o výpočetní čas jsme zaznamenali až dvojnásobný převis poptávky nad kapacitou tohoto superpočítače. Jeho vytíženost v posledních měsících dosahuje i 99 %, čemuž odpovídá klasifikace, že systém je přetížený.

Superpočítač Anselm, který byl uveden do provozu v červnu roku 2013 je sice na hranici své morální životnosti, nicméně přesto je stále některými uživateli využíván. Aktuálně probíhá výběrové řízení na pořízení jeho náhrady. K instalaci a zprovoznění tohoto nového systému by mělo dojít do konce příštího roku. 95 % prostředků na pořízení nového systému bude hrazeno opět z evropských strukturálních fondů. Zbývajících 5 % prostředků přinese Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, na jejíž půdě jsou superpočítače IT4Innovations provozovány. Obdobně se plánuje v roce 2020 výměna superpočítače Salomon za zcela nový systém.

Superpočítač Salomon dnes aktivně využívá přes 1400 uživatelů, z více než 60 různých institucí, řešících své úlohy v rámci 130 projektů. Nejvíce je využíván výzkumnými pracovníky z centra IT4Innovations, ústavů Akademie věd České republiky, brněnského CEITECu, Masarykovy univerzity, Univerzity Karlovy a ČVUT. Ze zahraničních uživatelů ho aktuálně využívají např. kolegové ze švédského KTH a Univerzity v Uppsale. Projekty, které tito uživatelé řeší, jsou z více než 50 % zaměřeny na materiálové vědy, dále pak na biovědy, fyziku částic a plazmatu, inženýrství apod.

Superpočítačová infrastruktura IT4Innovations byla v loňském roce hodnocena odborným zahraničním panelem v rámci průběžného hodnocení velkých výzkumných infrastruktur ČR nejvyšší možnou známkou jako excelentní. Centrum IT4Innovations bylo rovněž vybráno společností Intel jako prestižní pracoviště a společně s Lomonosovou Univerzitou jako jediné ze střední a východní Evropy bylo zařazeno mezi tzv. Intel Parallel Computing Centra. Obdobných ocenění by bylo možno jmenovat celou řadu. Objektivně je nutno říci, že superpočítačové centrum IT4Innovations je ve světě vnímáno velmi pozitivně. Je partnerem řady významných

infrastruktur, iniciativ a projektů a významným způsobem zviditelňuje českou vědu v oblasti HPC ve světě.

Tyto i řada dalších nezmíněných faktů nejsou zřejmě panu poslanci Pilnému dle jeho vystoupení známy. IT4Innovations nicméně vynakládá značné úsilí na propagaci a prezentaci své infrastruktury i HPC obecně. V roce 2017 jsme u nás v rámci exkurzí přivítali 1600 návštěvníků. V této iniciativě budeme pokračovat také v dalších letech. Rádi přivítáme kohokoli, kdo by měl zájem se více dozvědět o naší infrastruktuře a o tom, co umí.

Záznam předmětného jednání z poslanecké sněmovny parlamentu ČR:

<https://www.psp.cz/eknih/2017ps/stenprot/003schuz/s003015.htm#r6>

### **O Vítu Vondrákovi**

Doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D. působí na VŠB-Technické Univerzitě Ostrava již od roku 1993, přičemž nejdelší období strávil na Katedře aplikované matematiky při Fakultě elektrotechniky a informatiky, kde v roce 2007 získal titul docenta. Jeho odborné zaměření je numerická lineární algebra, optimalizační metody a High Performance Computing. V letech 1997 až 2007 strávil v rámci několika výzkumných pobytů 2 roky na Aalborg University v Dánsku, v roce 2004 a 2006 pobýval v USA na University of Colorado v Boulderu a Stanford University v Kalifornii.

V rámci své vědecké praxe vedl nebo se podílel na vedení řady výzkumných projektů. Mezi ty nejvýznamnější patří projekty 7. rámcového programu EU (PRACE-1IP, PRACE-2IP, PRACE-3IP a HARPA), projekty EU v rámci programu Horizont 2020 (PRACE-4IP, PRACE-5IP), projekt pro spolupráci s průmyslem InnoHPC v rámci programu Interreg, projekt CzeBaCCA pro spolupráci mezi ČR a Bavorskem v oblasti superpočítačových aplikací a projekt velkých infrastruktur ČR. Rovněž je hlavním řešitelem Intel Parallel Computing Centre financovaného společností Intel a spoluřešitelem Urban TEP projektu financovaného Evropskou kosmickou agenturou (ESA).

**IT4Innovations národní superpočítačové centrum** poskytuje českým i zahraničním výzkumným týmům z akademické sféry i průmyslu nejmodernější technologie a služby v oblasti superpočítání. V současné době provozuje IT4Innovations dva superpočítače – Anselm (instalován v létě 2013) a Salomon (instalován v létě 2015). IT4Innovations je také výzkumným centrem se silnými mezinárodními vazbami. Stěžejními tématy výzkumu IT4Innovations jsou zpracování a analýza rozsáhlých dat, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů, řešení náročných inženýrských úloh a modelování pro nanotechnologie.

### **Tisková mluvčí IT4Innovations:**

Karina Pešatová, mobil: +420 606 773 316, e-mail: [karina.pesatova@vsb.cz](mailto:karina.pesatova@vsb.cz)