

Проф. Стоян Марков:

Суперкомпютрите

Проф. д.т.н. Стоян Марков е директор на Националният център за суперкомпютърни приложения.

Той е единственият българин в експертната група на Сдружението за суперкомпютърни приложения на страните от ЕС, която обоснова необходимостта на ЕК да приеме решение за изграждането на европейска суперкомпютърна инфраструктура.

Решението бе обявено от еврокомисар Мария Габриел в първия ден на българското председателство на ЕК.

Проф. Стоян Марков пред българския суперкомпютър „Авитохол“ в София

СНИМКА: ЙОРДАН СИМЕОНОВ

АЛЕКСЕНИЯ ДИМИТРОВА

- Проф. Марков, още в първия ден на българското европредседателство Мария Габриел обявява решението на ЕК и страните членки да инвестират 1 млрд. евро за изграждането на европейска суперкомпютърна инфраструктура от световна класа. Каква ще е ползата за Европа да изгради такава инфраструктура?

- Това решение е навременно, даже бих казал малко закъсняло. До 2020 г. китайското правителство ще инвестира 22,3 млрд. долара в изграждането на най-мощната в света суперкомпютърна инфраструктура, произведена изцяло с китайски технологии, с китайски многоядрени микропроцесори, памети, комуникационно оборудване и микроелектронни елементи. С голяма част от тези средства ще се финансира създаването на софтуерни платформи с вграден изкуствен интелект за приложение в много области на икономиката и социалната сфера. Коментарите са, че китайците подготвят „оръжието“ за доминиране в индустрията, транспорта, търговията, въобще в бъдещия цифров свят и неговия контрол и управление. В близките няколко години и правителството на САЩ и частни инвеститори ще инвестират над 26 млрд. долара в целия спектър на цифровите технологии.

Както се вижда, вече сме в **активната фаза на нова революция.**

кардинално различна от досегашните индустриални и социални революции - сплав меж-

Те ще помогнат за създаването на нови лекарства, за битката с рака и за сигурността на самолетите, казва единственият българин, участвал в експертната група за създаването на европейска високотехнологична структура

ду високообразовани професионалисти, всеобхватни комуникационни мрежи, свързбързи суперкомпютри, автономни роботи и автоматични машини, които сами решават как да изпълнят възложената им поръчка или задача. Започва война за надмощие в световната икономика. Както обикновено тя има 2 цели - пари и господство.

ЕК бе наясно със ситуацията и последствията - слабите ги политически. Няма приятели и дружески държави. Решението за изграждане на европейска суперкомпютърна инфраструктура е историческо, защото ще ускори

приложението на цифровите технологии в европейската икономика.

ще запази конкурентоспособността на европейската продукция на световния пазар и ще подобри качеството на живот на европейските граждани, включително и на тези в България.

Катализатор на процеса на подготовка и гласуване на това решение бе г-жа Мария Габриел.

- Кой ще финансира проекта?

- Идеята е да се създаде нова правна и финансираща институ-

ция EuroHPC, която ще изгради европейската инфраструктура от високопроизводителни изчислителни системи и системи за съхранение и обработване на големи масиви от информация. Комисията ще вложи в него 486 млн. евро. Със същата сума ще се включат и държавите членки, и асоциираните държави. До 2020 г. в него ще бъдат акумулирани около 1 млрд. евро. Частните членове ще се включат и с непарично участие.

- Каква е най-близката цел?

- До 2020 г. съвместното предприятие ще получи два суперкомпютъра с производителност 100 PetaFLOPS - сто милиона милиарда, или 1017 изчисления в секунда. То активно ще участва в създаването на европейски технологии за производство на суперкомпютри с производителност над един ExaFLOPS (един милиард милиарда или 10 на 18-а степен изчисления в секунда) и в изграждането на мощностите за производството на първото поколение европейски микропроцесори.

- Готова ли е Европа за такъв компютърен бум?

- Въпросът ви е резонен. Една от целите на програмата е да насърчава приложенията, раз-

виването на уменията и по-широкото използване на високопроизводителните изчислителни технологии.

- Има ли период, в който трябва да се случи всичко това?

- Да, между 2019 и 2026 г.

- Има ли страна, на която е определена водеща роля?

- Планираната инфраструктура ще бъде притежавана и използвана съвместно от всички страни, подписали декларацията за EuroHPC, сред които и България. Други членове могат да се присъединят към това съвместно предприятие във всеки момент с финансов принос.

- За да стане ясно с какво се заема Европа, моля, дайте пример за изчислителната мощ на суперкомпютър с производителност 1018 операции в секунда.

- Хората на Земята наброява около 7,5 милиарда души. Да предположим, че всеки човек за една секунда събира, изважда или умножава две числа. Човечеството за една секунда ще извърши 7,5 млрд. операции, за една минута - 450 млрд., за час - 27 000 млрд., за ден - 648 000 млрд., за година - 236,5 милиона млрд. и за 4,5 години - един милиард по милиард операции. Суперкомпютър с производителност един ExaFLOPS ще направи

същия обем изчисления за една секунда

Ще дам и друг пример - процесорите, произведени от фирмите Intel, IBM, AMD и nVidia, имат производителност около 3 TeraFLOPS (хиляда милиарда или 10 на 12-та степен операции в секунда). Суперкомпютър с производителност 100 Petaflops

ще обедини около 45 000 процесора, свързани с бърза комуникационна мрежа.

- За какво могат да се използват суперкомпютри с такава производителност?

- За решаването на необозрими по обем задачи и за моделиране на сложни обекти. Макар че тези две понятия не се използват в науката, образно описват сферата на тяхното приложение.

Много хора мислят, че ако големите задачи се разделят на толкова сегмента (подзадачи), колкото е броят на процесорите, и всички процесори решават своите подзадачи едновременно с максимална скорост, то реалната производителност на суперкомпютъра ще бъде почти равна на сумата от производителността на процесорите. Това не е вярно! От решенията на подзадачите се сглобява решението на цялата задача. Този процес е съпроводен с активен обмен на голямо количество информация, който може да достигне 5-8 терабайта - хиляда по милиарда, или 10 на 12-та степен байта. Той се формира от

няколко хиляди потока данни.

всеки със скорост гигабайти в секунда.

Те трябва да се пренасят от комуникационната мрежа едновременно, без да се блокират взаимно, без задръствания и изчаквания. С други думи, дори да сме конструирали такава мрежа, дори в нея да няма задръствания и опашки от данни, обемът им е толкова голям, че времето за пренасяне то им е няколко пъти по-дълго от времето за изчисление.

На Европа ще вършат милиард по милиард операции в секунда

Така реалната производителност на суперкомпютъра ще падне до 30-35% от теоретичната. Тоест дадени са много пари за машина, която не можете да използвате ефективно.

- Какво е възможното решение?

- Едно от тях е пренесените данни да се съхраняват в специални паметни. Когато процесорът завърши изчисленията си, той изтегля данните от паметта и записва в нея информацията, предназначена за другите процесори. По този начин се препокрива времето за изчисление с времето за комуникации. Реалната производителност може да се повиши с още 10-15%. Тя може да нарасне с още 10-12%, ако алгоритмите за решение на задачата я разделят на блокове, така че да се обменя информация само между съседните блокове.

Иначе казано - с правилно избрана архитектура на суперкомпютър с доста сложна по конструкция комуникационна мрежа, с разделяне на задачата на подзадачи, с използването на високопроизводителни числени методи за тяхното решаване и с ефективна операционна система за управление на процесите, плюс оптимизирани транслятори от езици високо ниво, контролен и сервизен софтуер може да се достигне производителност около 60-70% от максималната.

- Звучи сложно, даже отчаящо.

- Така е, но това е, което трябва да свърши съвместно предприятие EuroHPC до 2020 г. Разбира се,

ще използва натрупаният световен опит за последните 20-25 години

Понеже успехът на всяко начинание зависи от хората, предприятието трябва да обедини висококвалифицирани

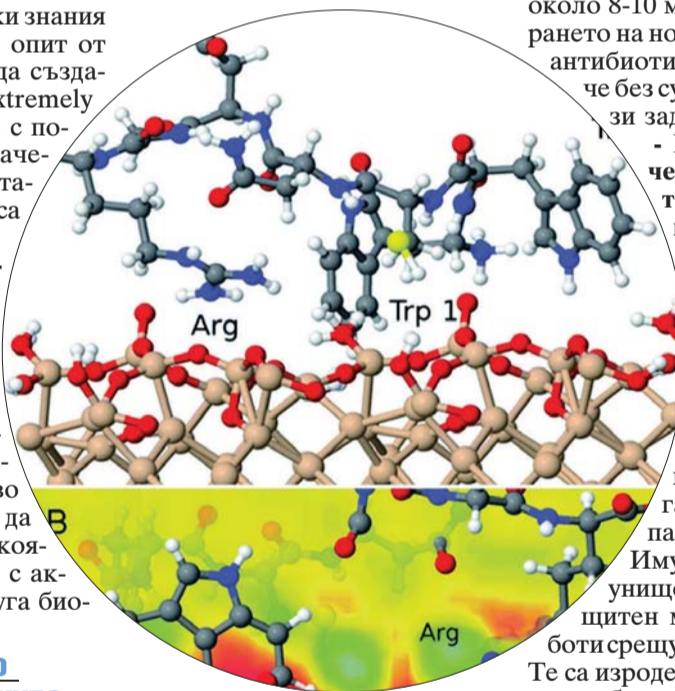
специалисти с дълбоки знания и богат практически опит от цяла Европа, които да създадат ExaFLOPS и Extremely Scale Supercomputers с по-горе изброените качества. За съжаление, такива специалисти не са много.

- Но това е бъдещето. Дайте примери за практическо приложение на ExaFLOPS суперкомпютрите?

- Един пример е подборът на молекули за бъдещи лекарства. Да се открие ново лекарство, означава да се намери молекула, която здраво се свързва с активния център на друга молекула.

Това е все едно търсиш игла в купа сено

И въпреки това фармацевтите откриват нови лекарства чрез класическата методика - между няколкостотин хиляди молекули се намират 2-3 кандидата за лекарство. Това се прави чрез стотици малки епруветки, наредени в платформи, които непрекъснато се движат. Такива подвижни маси в една фармакологична лаборатория може да бъдат десетки и даже стотици. Цената на материалите за една епруветка е между 20 и 130 долара. Проучване на британската агенция по икономика на здравето (Office of Health Economics) показва, че разходите и времето за откриване на ново лекарство са се увеличили от 125 млн. британски лири и 6 г. през 70-те г. до 750 млн. лири и 13,5 години през първото десетилетие на XXI век. За да намалят разходите и времето за излизане на пазара, преди 15 г. фармацевтичните фирми започнаха по-активно да използват суперкомпютрите, на които виртуално се осъще-



Изображение на суперкомпютърно моделиране, използвано при създаването на лекарства.

ствява същата процедура на изследване и подбор. За обработването на всяка виртуална епруветка се използва група от 20-25 процесора, а времето за моделиране зависи само от производителността на процесорите и софтуера.

Разходите за виртуална селекция на молекулите са 8-9 пъти по-малки!

Това ще позволи съществено да се намалят цените на лекарствата и всички са щастливи - държавата, защото се намаляват разходите на здравната каса. Фирмите, защото се разширява пазарът. Пациентите, защото лекарствата стават по-достъпни. Очакванията са, че със суперкомпютър с производителност 100 PetaFLOPS може да се намери вдъхващ доверие кандидат за лекарство за 5-6 месеца. Това не е лош, но не и достатъчно добър резултат. Трябват ни по-бързи машини и по-ефек-

тивен приложен софтуер.

- Дайте други примери.

- Друго възможно приложение е

заобикалянето на резистентността на бактериите към антибиотиците

Природата е създавала естествена биомашина с програмно управление, която синтезира всички биомолекули на всички живи същества на Земята. Това е рибозомата. Мишената на почти всички използвани досега антибиотици е каналът за синтез в рибозомата на бактериите. Те се опитват да „запушат“ този канал в началото, средата или в края. Но природата е създавала универсално средство за защита - мутацията. Бактериите променят пространствената конфигурация на групата атоми, към които се закача антибиотикът и той не може да остане в канала. Ако се промени контактната част на антибиотика така, че да може да се закачи към мутиралата група от атоми и да спре процеса на синтеза на биомолекули, той ще може отново здраво да запуши канала. Това се прави с прецизен много сложен и твърде скъп, но всеобхватен софтуер. Обемът на изчисления е около 10 на 22-а степен операции. На ExaFLOPS машината те ще продължат само около 160-200 часа. Фармацевтите считат, че после ще са нужни още около 8-10 месеца за синтезирането на новата структура на антибиотика. Те са убедени,

че без суперкомпютри тази задача е нерешима

- Неотдавна четох, че суперкомпютрите могат да се използват и в терапия за лечение на рака.

- Да, така е. Обичайно в кръвта циркулират специфични маркери, които се свързват с чужди на организма тела, попаднали в него. Иммунната система ги унищожава, но този защитен механизъм не работи срещу раковите клетки.

Те са изродени здрави клетки, които бързо мутират и имунната система ги приема за свои. За да ги унищожи, те трябва да се маркират със специфични антители. Преодоляването на мутациите може да стане чрез цифровите модели на мутиралите белтъци, с помощта на които на суперкомпютър се променят антители, за да могат непрекъснато да се приспособяват към мутациите. Това подробно е описано в статиите на проф. Оливие Мишелин, ръководител на отдела за борба с меланомата в института по рака в Лозана, Швейцария. Над 45 процента от неговите

пациенти, включително такива, които са имали метастази, са в ремисия

- Вярно ли е, че суперкомпютрите могат да се използват и при проектирането на корпуса на самолетите?

- Да. При конструирането на самолета много важно е точно да се изчислят натоварването и стойностите на сръзвачите и

усукващи сили в няколко десетки хиляди точки на обшивката и корпуса на самолета, за да се провери дали ще издържат на екстремални натоварвания.

Разпределението на натоварването и силите се описва със система частни диференциални уравнения. С помощта на метода на крайните елементи те се трансформират в линейна система алгебрични уравнения. С този цифров модел на суперкомпютър се проверява ще издържи ли корпусът на бъдещия самолет екстремални външни натоварвания като попадане в зоната на мощен ураган, силни удари при принудително кацане, неправилен ъгъл на кацане, силен удар при посрещане на пистата. Виртуално се проиграват много варианти на тримерната конструкция на корпуса и се подбират комбинации от метали, композити и полимери, за да се избере една с гарантирана якост и минимално възможно тегло.

За пътнически самолети като „Ербъс А 380“ или „Боинг 777“

линейната система е с няколко десетки милиарда уравнения. Нейното решаване е по силите само на крайните PetaFLOPS машини, но и те смятат с часове.

Резултатите от виртуалното тестване на самолет, проектиран със суперкомпютри, практически съвпадат с резултатите от физическите тестове. Това е дало основание на компанията по въздухоплаване на Франция да разреши да се проведат изпитания във въздуха само с два самолета „Ербъс А 380“ вместо, както е бил регламентът, с три. Икономията за фирмата „Ербъс“ е била около 180 млн. евро.

На сайтовете на Националния център за суперкомпютърни приложения и на Европейското сдружение за суперкомпютърни приложения (PRACE) може да се намерят още успешни приложения на суперкомпютрите в различни области, включително такива за малките и средните предприятия.

- Каква ще е ползата за България от членството ѝ в EuroHPC?

- Преди 34 г. ние разработихме и започнахме производство по поръчка на първия и единствен суперкомпютър в социалистическите страни. Имаме много добри специалисти в областта на суперкомпютърните приложения в науката и индустрията. За съжаление, голяма част от тях живеят и работят в други европейски страни и САЩ. Но това не им пречи, ако имат желание, да работят от страна на България в проектите PRACE. Нашата страна е член на сдружението.

Това са солидни предпоставки България да стане център на Балканите по приложения на суперкомпютрите в много области на човешката дейност.

Със средства от EuroHPC и със свое участие можем да изградим първия PetaFLOPS компютър в тази част на Европа, да инсталираме в него широк спектър от приложен софтуер и да организираме перманентно обучение на специалисти от съседните страни и от България как да използват суперкомпютрите в своята работа.