



PRIOPĆENJE ZA MEDIJE

Novi softver s 'Ruđera' za brže simulacije na superračunalima

Preliminarni rezultati pokazuju značajno skraćenje izračuna. Uskoro pilot test na europskim superračunalima.

ZAGREB, 9. 7. 2025. - Dok cijeli svijet gradi golema superračunala veličine zgrada koja u jednoj sekundi mogu izvesti nevjerojatnih tririlijun (10^{18}) operacija u sekundi, tzv. eksaskalarna računala, predani tim znanstvenika Centra za informatiku i računarstvo (CIR) na Institutu Ruđer Bošković (IRB) piše svoju priču u svijetu superračunala. U suradnji s partnerima iz Njemačke i Francuske razvili su novi softver, u sklopu eksperimenta LimitX, koji je nedavno izabran za jednu od ["uspješnica" europskog projekta Inno4scale](#). Preliminarni rezultati pokazuju da ovaj softver koristeći metode strojnog učenja i neuronskih mreža ubrzava trajanje kvantnih simulacija iz dana u sate.

Eksaskala, objašnjavaju stručnjaci, označava novu razinu brzine superračunala. Naša osobna računala, opremljena brzim grafičkim karticama, mogu obraditi do bilijun (10^{12}) računskih operacija u sekundi, dok eksaskalarna računala postižu trilijun ili više operacija u sekundi.

Za usporedbu, kad bi svaki čovjek na ovom svijetu mogao obaviti jednu računsku operaciju u sekundi, svim ljudima bi trebalo skoro četiri godine da obave količinu posla koju jedno superračunalo može napraviti u samo jednoj sekundi. Upravo ta ogromna brzina omogućuje napredak u mnogim područjima, od precizne medicine i klimatskih istraživanja do istraživanja i razvoja novih materijala, no samo kada softver zna kako iskoristiti tu snagu.

Tim koji uz ruđerovce stoji iza LimitX-a, Superračunalni centar Juelich (JSC) iz Njemačke i Francuska komisija za alternativne energije i atomsku energiju (CEA), radio je godinu dana na razvoju ovog softvera u sklopu europskog projekta Inno4scale, vrijednog 4,5 milijuna eura.

Ovaj projekt vodi Superračunalni centar u Barceloni, a partneri su im švicarski SCAPOS, njemački nacionalni centar za računarstvo visokih performansi u Stuttgart (HLRS) i PRACE mreža.

O čemu je riječ i kako radi novi softver?

Dosad su kvantne simulacije proteina koristile numeričke metode temeljene na kvantnoj mehanici kako bi izračunale raspodjelu elektrona i energiju sustava, često kroz iterativne procese visoke računalne zahtjevnosti. Ovakav postupak je često vrlo spor i neefikasan jer zahtjeva izračun jako velikog broja različitih parametar, no LimitX tu proceduru mijenja.

"Osnovna ideja nove metoda je da pokuša „pogoditi” dobro inicijalno rješenje. Kao primjer možete zamisliti da vas netko ostavi na cesti i kaže vam da što prije nađete put do Rima. Bez ikakvih dodatnih informacija trebat će vam puno vremena kroz metodu pokušaja i pogrešaka da nađete pravi put. Ako ipak imate informaciju da ste na sjeveru i da idete na jug, broj



PRIOPĆENJE ZA MEDIJE

Institut Ruđer Bošković, Ured za odnose s javnošću,
✉ pr@irb.hr 🌐 www.irb.hr

pokušaja će se znatno smanjiti i vi ćete brže stići do svog odredišta," objašnjava dr. sc. **Davor Davidović**, voditelj CIR-a.

Slično je i kod LimitX-a, prije nego krene s glavnom simulacijom, LimitX analizira („učiči“) na prijašnjim primjerima i na temelju toga predviđa najvjerojatniju raspodjelu elektrona koristeći metode strojnog učenja i neuronskih mreža. Zahvaljujući toj početnoj procjeni računalu će trebati znatno manje koraka da dođe do istog, točnog rješenja, što smanjuje vrijeme izračuna s nekoliko dana na samo nekoliko sati, ponekad čak i minuta.

Takvo ubrzanje otvara brojne mogućnosti. Farmaceutske kompanije mogle bi u tjedan dana ispitati stotine tisuća molekula, umjesto da se ograniče na desetke, a istraživači i inženjeri koji rade na razvoju novih materijala mogli bi brže otkrivati nove spojeve. Kako eksaskalarna superračunala dosežu nevjerojatne brzine, ovakvi pametni softveri mogu osigurati da se ta snaga u potpunosti iskoristi.

Dr. sc. **Davor Davidović**, poručuje: "Dok eksaskalarna računala pristižu, pravo pitanje postaje kako ih pametno koristiti. Bez novih i naprednijih algoritama i softvera, ni najbrži hardver ne može sam otkriti pravi put."

Sljedeći korak: pilot test na EuroHPC

U nadolazećim mjesecima CIR-ov tim priprema LimitX za pilot testiranje na stvarnim eksaskalarnim računalima dostupnima akademskoj zajednici i industriji u sklopu EuroHPC mreže superračunala.

„Ako se potvrde dosadašnji preliminarni rezultati, predložena računalna metoda bi uskoro mogla ući u standardne pakete alata za kvantne simulacije koje koriste sveučilišta, istraživački instituti i farmaceutske kompanije diljem Europe“, objašnjava dr. sc. **Jurica Novak** iz CIR-a.

Članovi LimitX tima s IRB-a su dr. sc. Jurica Novak, dr. sc. Abhiram Kaushik Badrinarayanan i dr.sc. Davor Davidović, a ostali članovi su s Juelich superračunalnog centra: dr. sc. Edoardo di Napoli, dr. sc. Xinzhe Wu i Francuske agencije za alternativne izvore energije (CEA): dr. sc. Luigi Genovese.

O Inno4scale projektu: Inno4scale je europska inicijativa čiji je cilj podržati razvoj i prilagodbu ključnih znanstvenih aplikacija za eksaskalarna računala. Kroz suradnju vodećih istraživačkih centara, projekt potiče inovacije koje će potaknuti znanstveni i industrijski napredak u području medicine, znanosti o materijalima i drugih tehnoloških grana.

Korisne poveznice:

<https://www.inno4scale.eu/success-story-limitx/>

Kontakt sugovornika na temu:



PRIOPĆENJE ZA MEDIJE

Institut Ruđer Bošković, Ured za odnose s javnošću,

✉ pr@irb.hr 🌐 www.irb.hr

dr. sc. Davor Davidović

voditelj centra, viši znanstveni suradnik

Centar za informatiku i računarstvo

Davor.Davidovic@irb.hr

dr. sc. Jurica Novak

znanstveni suradnik

Centar za informatiku i računarstvo

Jurica.Novak@irb.hr