

VÁLTOZATLANUL ÓRIÁSI SZÜKSÉG ÉS IGÉNY VAN A BME SZUPERSZÁMÍTÓGÉPÉRE

2016. december 14.

Négy éve csaknem maximális kihasználtsággal üzemel a „Superman”, amelyet eddig közel 200 tudományos publikációhoz használtak a Műegyetem kutatói és hallgatói.

„A nagyteljesítményű számítógépek számítási kapacitása ma már elengedhetetlen számos szimulációval és elméleti modellezéssel egybekötött kísérlethez. A legtöbb kutatóegyetemen alapvető infrastrukturális feltételnek számít egy ilyen eszköz, amely a lehetőségek széles tárházát biztosítja a fejlesztési projektekből résztvevő kutatóknak” – összegezte a szuperszámítógép előnyeit **Szeberényi Imre**, a BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar Irányítástechnika és Informatika Tanszék (IIT) docense és a Közigazgatási és Informatikai Központ kutatás-fejlesztési igazgatóhelyettese, a berendezés intézményi felhasználásának felügyelője.



Az egyetemi köznyelvben „Superman” nevet viselő eszközt 2012 őszén egy Társadalmi Operatív Program (TÁMOP) keretében vásárolta meg a BME mintegy 70 millió forintért. A 360 processzormagos, klaszter rendszerű gép az R épületben található (a bme.hu korábban tudósított a „Superman” első évének teljesítményéről és interjúkat készítettünk olyan kutatókkal, akik a műegyetemi szuperszámítógépet használják kísérleti számításaikhoz – szerk.).



Az idén négy éves számítógépet szinte valamennyi oktatási szervezeti egység alkalmazza kutatásaihoz. „A tanszékek is rendelkeznek saját informatikai állománnyal, ám a szuperszámítógép kapacitása, hardver- és szerveroldali támogatása messze a legnagyobb és a legfontosabb a BME-n” – ecsetelte a „Superman” adottságait Szeberényi Imre. Tapasztalatai alapján 2012 szeptembere óta folyamatosan nő az igény a bonyolult algoritmusok futtatására.

A legtöbbet a Természettudományi Kar kutatói használják a gépet fizikai és matematikai kísérleteikhez, valamint a Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar tudósai igénylik biológiai, kémiai és fizikai vizsgálataikhoz. 2013 januárjától 2016 júliusáig a számítógépen elvégzett ún. „jobok” (magyarul feladatok) száma kb. 240 ezer volt, az ehhez felhasznált CPU órák száma pedig közel 10 millióra tehető. Ekkora számítási feladatot egy átlagos 2 magos asztali gép 5-600 év alatt lenne képes elvégezni. A „Superman” kihasználtsága átlagosan 85 százalékos.

Szeberényi Imre további érdekességként említette, hogy a szuperszámítógéppel végzett számítások eddig közel 200 tudományos publikáció, köztük 87 folyóiratcikk létrejöttéhez járultak hozzá. Utóbbiak átlagos impaktfaktora (IF) 5-nél magasabb, 12 publikáció impaktfaktora 8 felett van, 11 cikké pedig a 10-es impaktfaktort is meghaladja. A legnagyobb értéket **Nyulászi László**, a BME VBK Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék tanszékvezető egyetemi tanára és **Kelemen Zsolt**, a tanszék tudományos segédmunkatársa közös tanulmánya érte el. A Bonni Egyetem kutatóival együttműködésben az általuk előállított molekuláról elméleti kémiai számításokkal megmutatták, hogy a szerkezetéből következő kémiai viselkedésén túl „rejtett reakciókészséggel” is rendelkezik. Kelemen Zsolt az eredmény lényegét röviden így összegezte: „az előállított molekulát hidrogén-, szén-, nitrogén- és foszforatomok építik fel és öttagú gyűrűt tartalmaz. Érdekessége, hogy jelentős ún. töltés szeparáció valósul meg molekulán belül: a molekula gyűrűje pozitív töltésű, míg a foszfort tartalmazó rész negatív töltésű. Úgy is el lehet képzelni, mint a 'sült fagylaltot'. Ezen kívül a molekula egy protonvándorlás során könnyen át tud alakulni egy másik izomerré, ami eltérő reaktivitást mutat az eredeti molekulához képest” (a publikáció eredeti címe: „*Synthesis of an Imidazolium Phosphanide Zwitterion and Its Conversion into Anionic Imidazol-2-ylidene Derivatives*” – szerk.).

„A „Superman” számítási kapacitási lehetőségei a műegyetemi hallgatókra is ösztönzőleg hatnak, amikor témát választanak a Tudományos Diákköri Konferenciákra, projektfeladatoknál vagy szakdolgozatok, diplomamunkák megírásakor” – hangsúlyozta az Informatikai Központ kutatás-fejlesztési igazgatóhelyettese, kiemelve néhány érdekes példát a fiatal mérnökök pályamunkáiból. „A „Superman”-en futó szoftverek felhasználásával kapott eredményeket az anyagtudománytól a molekuláris biológiáig használják. A fizikusok új mágneses anyagok felfedezéséhez végeztek számításokat a szuperszámítógépen, és szilárdtest-fizikai vonatkozású, számítógépes szimuláción alapuló vizsgálatokat hajtottak végre. A vegyészmérnökök főleg kémiai, vagy akár enzimreakciók virtuális modellezéséhez használják a gépet. Műegyetemi diákok vizsgálták például a szél által keltett vízhullámok erózióját a Fertő-tónál. Egy másik témában a folyami hajók gerjesztette hullámok partmenti következményeit elemezték, amelyek többek között a vízzáró gátak hosszú távú állóképességére lehetnek hatással.”



Szeberényi Imre felidézte első találkozását egy nagyteljesítményű számítógéppel, egy külföldi tanulmányútjának kedves szakmai emlékét. „Az amerikai New York állambeli Cornell Egyetemen ipari megbízásra dolgozott egy elméleti és egy gyakorlati kutatócsoport egymástól függetlenül azon, hogy a kereskedelmi forgalomban kapható papírpelenkákban található műanyag szálakat úgy helyezze el, hogy a pelenkák nedvszívó képessége nagyobb legyen. Az elméleti kutatócsoport a helyi szuperszámítógéppel modellezte a lehetőségeket, és végül azonos következtetésre jutott a gyakorlati kísérleteket végző csapattal, ’összeérték’ a külön utakon elindított kutatási irányok. A szuperszámítógéppel tehát az ember által végzett manuális számítások automatizálhatók, felgyorsíthatók és hatékonyabbá tehetők.”

„A Superman sikerrel alkalmazható intézményeken átívelő kutatásokban is” – hívta fel a figyelmet az igazgatóhelyettes. A „BioKlíma” projektben (*a kutatás teljes neve: BioKlíma Konzorcium – A klímaváltozás hatása az emberi egészségre és a bioszféra elemeire* – szerk.) a BME a Semmelweis Egyetemmel, a gödöllői Szent István Egyetemmel és az MTA Agrártudományi Kutatóközpont Állatorvos-tudományi Intézettel közösen vett részt közös tudományos konzorciumban. A Semmelweis Egyetem által vezetett kutatási programban résztvevő kutatók többek között a környezeti tényezők genotoxikus (*sejtek örökítő anyagára káros hatással ható mérgegyanyag* – szerk.) hatását elemezték a neurodegeneratív és neurodevelopmentális betegségek kialakulására (például demenciára, autizmusra stb.). Magyarországon elsősorban az Aspergillus flavus gombafaj által termelt mérgegyanyag, az aflatoxin bomlásterméke hazai földrajzi terjeszkedésének lehetséges módjait vizsgálták. „A globális felmelegedés egyik következménye, hogy az aflatoxint termelő gombafaj egyre északabbra húzódik Európában, és megjelent már az egyik legfontosabb mezőgazdasági terményben, a kukoricában is. A kutatásban modern bioinformatikai módszerekkel, azaz az előrejelzések reális megalkotásával prognosztizálták, hogy a mérgegyanyag bekerülhet-e a tehéntejbe, illetve a táplálkozási láncban keresztül az emberi anyatejbe” – hangsúlyozta, hozzátéve, hogy a BME a számításokhoz szükséges informatikai háttérrel biztosította. Egyes algoritmusok a műegyetemi szuperszámítógépen futottak le, a VIK Méréstechnika és

Információs Rendszerek Tanszék munkatársainak segítségével pedig korreláció-számításokat végeztek, és az aflatoxin előfordulásának összefüggéseit elemezték. A mérgeanyagnak súlyos egészségkárosító következményei lehetnek. Feltételezhető, hogy az anyatejbe bekerülve a csecsemőkben másodlagos genetikai eltéréseket okoz. „A kutatás végeredménye szerint egyelőre nem kell tartanunk az aflatoxin előfordulásától a magyarországi táplálkozási láncban” – foglalta össze a szuperszámítógéppel végzett egyik igen jelentős vizsgálat eredményeit Szeberényi Imre.



A gyors informatikai fejlődés természetesen a műegyetemi szuperszámítógépet sem kíméli, és a kutatási projektek csak átmeneti támogatást jelenthetnek a „Superman”-nek, amelyet négy évvel a megépítése után már az avulás veszélye fenyeget. „A 2013-as BioKlíma kutatás keretében 120 terabyte méretű háttérkapacitással bővítettük az eszközt, e tárhely egy részét ma is alkalmazzuk az éppen zajló munkákhoz.” Az elmúlt két évben az üzemeltetők próbálták enyhíteni a szerkezet túlterheltségét azzal is, hogy bizonyos paraméterező feladatokat a Kormányzati Felhőbe (KOF) küldenek, így 2014 tavaszától átmenetileg 240 processzormaggal bővült a „Superman” kapacitása.

Szeberényi Imre sajnálattal jegyezte meg, hogy a közeljövőben nincs kilátás a szuperszámítógép fejlesztésére, hiszen 2010 óta szünetelnek az egyetemi informatikai beszerzések. A TÁMOP pályázat 3 évig kötelezi az egyetemet a szerkezet fenntartására és üzemeltetésére, ám a BME ennél hosszabb távon tervez ezzel az eszközzel. Ehhez bizonyos időközönként szükség van a gép bővítésére és korszerűsítésére. „Egy évvel ezelőtt széleskörű egyetemi összefogással kaptunk támogatást egy hardver garancia-kiterjesztés megkötésére, ám további fejlesztésekre, korszerűsítésre is szükség lenne. Többször felvetődött, hogy igény volna például a MATLAB program (*numerikus számítások elvégzésére kifejlesztett speciális programrendszer* – szerk.) licenzének beszerzésére is, amelyet többek között a műegyetemi informatikusképzésben is sikerrel alkalmazhatnának oktatóink” – foglalta össze az Informatikai Központ igazgatóhelyettese, hozzáfűzve, hogy a szuperszámítógéppel végzett, nagy számítás

igényű kísérletek eredményei a műegyetemi kutatások nemzetközi hírnevének öregbítéséhez is hozzájárulnak.

TZS - TJ

Fotó: TZS

Facebook