HPC ECHO

Tudománytól Innovációig



ISBN: 978-6-15019-180-5

2024

Tartalom

Új dimenzió a mutációk klinikai jelentőségében: Alphafold-alapú genetikaivariáns-annotáció	3
Tengelysúlymérés hídra telepített nyúlásmérő bélyegek adatai alapján	6
A Szupercsapat: szupernóvák a szupernagy tömegű fekete lyukak közelében	8
Szintetikus nyelvtanítás HPC-környezetben	10
Párhuzamos multi-GPU-algoritmusok fejlesztése agyi EEG-adatok feldolgozásához	12
Hogyan lehetnek pontosabbak a meteorológiai előrejelzések?	14
A városi légszennyeződés szimulációja, általános célú HPC-portál és áramlástani megoldók fejlesztése	16
Szuperszámítógépekkel a mikrobiom-tervezés felé	18
The Magnetic Exchange — MagEx projekt	20

Előszó

Kongó Krisztián

Elnökhelyettes



Immár negyedik alkalommal indítjuk útjára a HPC ECHO „Tudománytól Innovációig” című kiadványt a HPC Kompetencia Központ támogatásával, amelyben hírt adunk arról, hogy a közelmúltban átadott Komondor szuperszámítógép (HPC) hogyan szolgálja a kutatásokat szinte valamennyi tudományágban. A Komondor már a próbaüzeme alatt hozzájárult számtalan tudományos munka, fejlesztés eredményéhez, mára folyamatos működésével világviszonylatban is jelentős kutatói és innovációs lehetőséget rejt a hazai felsőoktatás, a nagyipar és az egyre számosabb kis- és középvállalat felhasználója számára. A mostani kiadványban a szupernóvák megfigyelésétől a mikrobiom-tervezésen át az orvosi kutatások szuperszámítógéppel történő megvalósításáig számos témáról tájékozódhatnak az érdeklődők. Bízom benne, hogy az itt olvasottak alapján sokan döntenek úgy, hogy csatlakoznak a HPC-felhasználók köréhez, és igénybe veszik Közép-Európa jelenleg egyik legkorszerűbb szuperszámítógépének szolgáltatásait, amely 6 petaflops teljesítményével, a szükséges szoftveres háttérrel és teljes körű felhasználói támogatással várja a szakembereket.

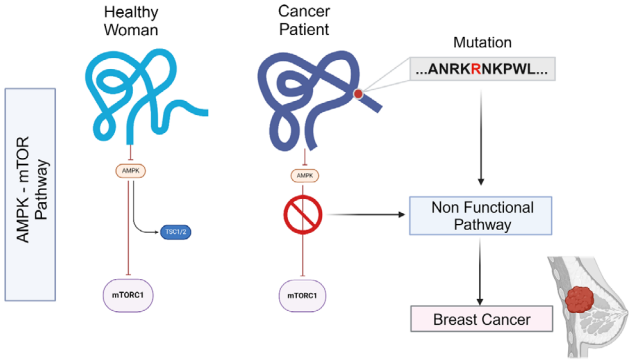
HPC Kompetencia Központ

HPC @hu
Kompetencia Központ

Új dimenzió a mutációk klinikai jelentőségében: Alphafold-alapú genetikaivariáns-annotáció

A genetikai variánsok a DNS-szekvencia olyan változásai, amelyek különböző mechanizmusokon keresztül befolyásolhatják a fehérjék működését. E variánsok némelyike jóindulatú, és nem befolyásol fontos biológiai folyamatokat, míg mások változásokat okozhatnak a fehérjék szerkezetében, a splicingban vagy az expresszióban, és rák kialakulásához vezethetnek. Idővel ezek a mutációk felhalmozódnak, hozzájárulva a rákos sejtek komplexitásához és ellenőrizetlen növekedéséhez. E variánsok génműködésre gyakorolt hatásának és fenotípusos következményeinek megértése kulcsfontosságú annak felismeréséhez, hogy miként befolyásolják a rák kialakulását.[1]

Az újgenerációs szekvenálási technikák kifejlődése nagymértékben megkönnyítette a genetikai szűrést mind a rákos betegek, mind az egészséges egyének esetében.[2] Ezek a technikák gyorsan a klinikai genetika szerves részévé váltak, lehetővé téve több száz, illetve több ezer misszenszváltozat azonosítását. Ugyanakkor ez a kiterjedt szűrés egy jelentős probléma felszínre kerüléséhez is vezetett: e genetikai variánsok meghatározó részének esetében nem rendelkezünk információval arról, hogy azok hogyan befolyásolják a fehérje működését és végső soron a rákbetegség kialakulásának kockázatát.[3] Ezek az ismeretlen szignifikanciájú variánsoknak (VUS) minősített variánsok azonosításukkor komoly kihívást jelentenek az orvosok számára, és jelentős stresszt okoznak, különösen a betegeknek.



1. ábra: *Egy patogén mutáció hatása a hipotetikus biológiai útvonal normális működésére. Az ábra összehasonlítja az útvonal normális körülmények közötti működését a mutáció miatt megváltozott állapotával, kiemelve azokat a kulcsfontosságú pontokat, ahol a mutáció megzavarja a normális folyamatokat, és működési zavarokhoz vezet.*



HUN-REN Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Mutagenezis és Karcinogenezis kutatócsoport
Delta Bio 2000 Kft.
European Life Technologies Zrt.

A Szegedi Biológiai Kutatóközpont Mutagenezis és Karcinogenezis Kutatócsoportja, Haracska Lajos vezetésével, több mint két évtizede foglalkozik a daganatos folyamatok kialakulásához vezető mutációs események vizsgálatával. A kutatócsoport a legmodernebb biokémiai módszereket alkalmazza, amelyeket genomikai és transzkriptomikai vizsgálatokkal egészít ki. Az általuk felállított modelleket humán szövetkultúrákon, mikroszkópos technikákkal validálják, biztosítva ezzel a kutatási eredmények megbízhatóságát és pontosságát.

A Delta Bio 2000 Kft. a daganatok molekuláris genetikai analíziséhez szükséges módszerek és szolgáltatások fejlesztésére specializálódott. A vállalat napi szinten szembesül az ismeretlen kimenetű szomatikus variánsok jelentette kihívásokkal, és folyamatosan dolgozik azok megoldásán, hogy elősegítse a pontos diagnózis és hatékony kezelés kialakítását.

A European Life Technologies Zrt. elsősorban a daganatos betegségek likvid biopsziából történő monitorozásához és szűréséhez kapcsolódó molekuláris biológiai kutatásokra és professzionális IT-megoldások fejlesztésére összpontosít. A projekt során keletkező nagy mennyiségű adat tárolásában és a közösség számára történő elérhetővé tételében is jelentős szerepet vállalnak, biztosítva ezzel a kutatási eredmények széles körű hozzáférhetőségét és hasznosíthatóságát.

Az elmúlt évtizedben gépi tanulási algoritmusokat fejlesztettek ki és alkalmaztak az ilyen VUS-ok osztályozásának elősegítésére.[4] Ezek a módszerek kellő hatékonyságot mutattak ahhoz, hogy bekerüljenek a variánsok értelmezésére vonatkozó ACMG/AMP-irányelvekbe (Richards et al., 2015), ugyanakkor olyan inherens korlátokkal rendelkeznek, amelyek befolyásolják hasznosságukat klinikai környezetben (Sun és Yu, 2019; Liu és mtsai., 2022), és számos variáns értékelése továbbra sem egyértelmű. Ez rávilágít arra, hogy további erőfeszítésekre van szükség a robusztusabb algoritmusok kifejlesztésére, vagy predikciós képességeik javítására.

A fehérjék funkciói nagymértékben függenek tercier szerkezetüktől, amelyet az aminosav-szekvencia határoz meg. Ezért ha meg tudjuk jósolni, hogy az aminosav-szekvencia változása hogyan befolyásolja a tercier szerkezetet, akkor esélyünk lehet predikálni, hogy az hogyan befolyásolja a funkciót. Ezek az

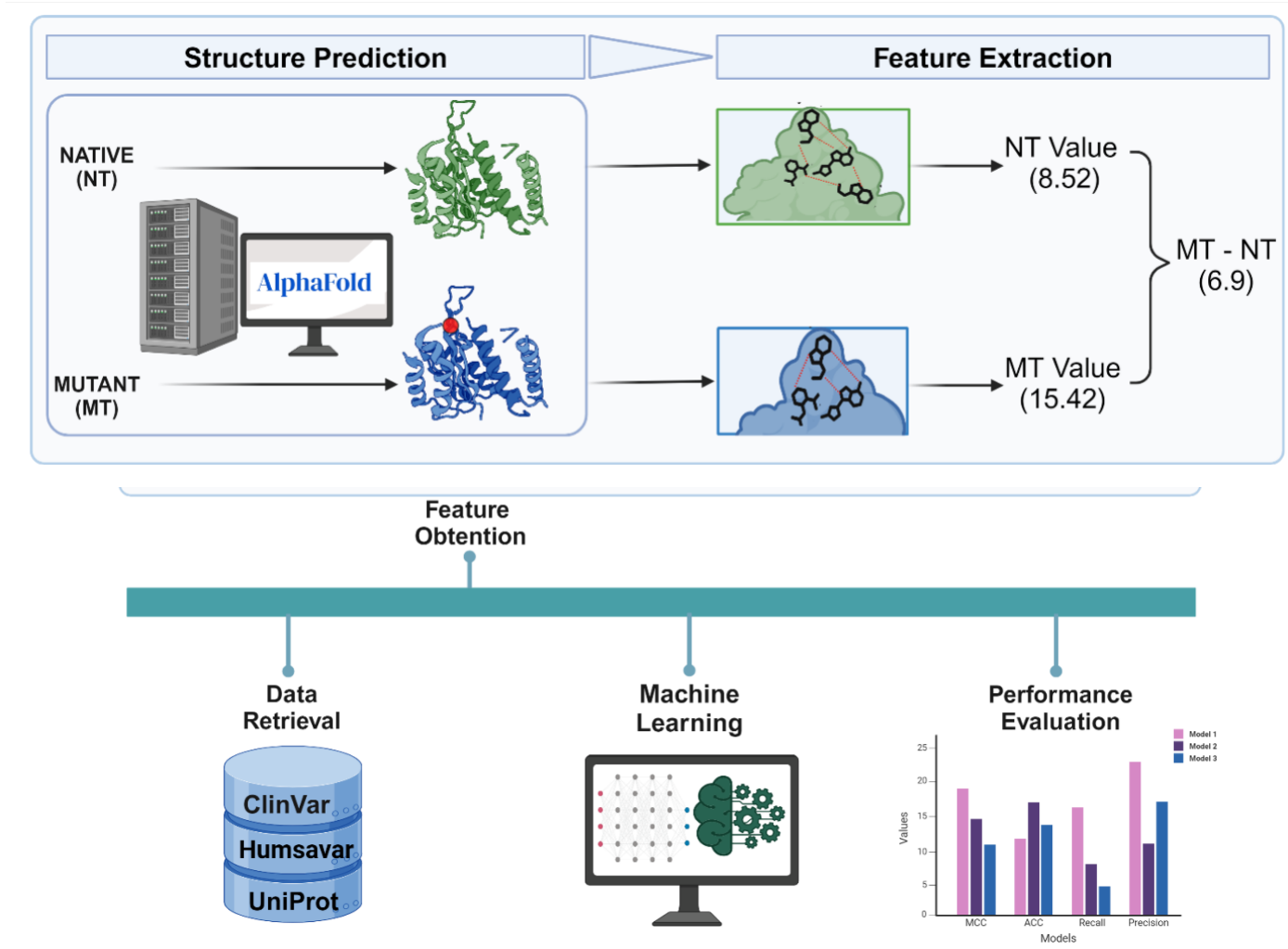
aminosav-változások azonban számtalan módon befolyásolhatják a fehérje szerkezetét, ezért számítási modell nélkül lehetetlen olyan előrejelzést adni, amely elég pontos ahhoz, hogy diagnosztikai célokra felhasználható legyen. Eddig az új predikciós eszközök fejlesztését alapvetően korlátozta, hogy számos fehérje háromdimenziós szerkezete nem állt rendelkezésre a klinikai genomban.

Jelentős áttörést jelentett az AlphaFold2 mesterséges intelligenciával működő fehérjeszerkezet-predikciós algoritmus kifejlesztése, amely ma már gyakorlatilag bármilyen fehérje háromdimenziós szerkezetének pontos előrejelzését lehetővé teszi.[7] Ennek eredményeképpen rengeteg új, a szerkezetből származó jellemzőt sikerült létrehozni, amelyek rendkívül ígéretesnek bizonyultak, és amelyek most kerülnek integrálásra a misszenszvariánsokat osztályozó algoritmusok következő generációjának tanításába.[8] Mindazonáltal a mutáns fehérjeszerkezetek hiánya miatt ezek az erőfeszítések a natív szerkezet által hordozott információkra korlátozódtak, és így potenciálisan kimaradtak olyan lényeges információk, amelyek javíthatnák ezen eszközök osztályozási teljesítményét.

E kérdés megoldásához számítási szempontból hatalmas kihívással néztünk szembe: a Humsavarból, egy jól kurált humán mutációs adatbázisból származó, mintegy 70 000 patogén és jóindulatú misszenszvariáns 3D szerkezetének kinyerését céloztuk meg. E nagyszámú fehérjeszerkezet predikciója jelentős számítási erőforrásokat igényel, amelyeket csak egy nagy teljesítményű számítógépes (HPC) klaszter tud biztosítani.

Kezdetben az AlphaFold2-t használtuk a natív és a mutáns szerkezetek nagy léptékű predikciójához. Ez a folyamat két fő lépést foglal magában: az első a szekvencia-adatbázis lekérdezése a célfehérje többszörös szekvenciaillesztésének elkészítéséhez, ami jelentős CPU-erőforrásokat igényel, a második a fehérjeszerkezet predikciója a mélytanulási modell segítségével, ami nagy teljesítményű grafikus feldolgozóegységeket (GPU) igényel. Tekintettel az adathalmazunkban található viszonylag hosszú fehérjeszerkezetekre, hamar észrevehetővé vált, hogy az AlphaFold2 esetén a CPU jelenti a szűk keresztmetszetet, ami a fehérjeszerkezetek létrehozásához szükséges teljes időt megnöveli.

E probléma megoldása érdekében a ParaFoldra (az AlphaFold2 HPC-re optimalizált implementációja) váltottunk a nagyszámú fehérjeszerkezet-predikciókhoz, mivel az a fent említett lépéseket két különálló folyamatra osztja, amelyek külön-külön speciális partícióknak adhatók meg. A ParaFold segítségével 14 hónap alatt egy 68 000 fehérjeszerkezetből álló, átfogó készletet hoztunk létre, amely 11 612 vad típusú és 57 026 mutációt tartalmazó struktúrát foglal magában. Az adathalmaz jelenleg összesen 50 terabájtot foglal el.



2. ábra: *A misszenszvariánsok hatását előrejelző algoritmus fejlesztésének munkafolyamata, amely az adatkinyerési lépéssel kezdődik, és egy mélyreható teljesítményértékeléssel zárul. A hangsúlyt a szerkezetpredikció és a jellemzőkinyerés folyamataira helyezzük.*

Tudományos csoportunk érdeklődésének középpontjában a karcinogenezis folyamata áll, és szoros együttműködést folytatunk a Delta Bio 2000 Kft.-vel a molekuláris rákdiagnosztika területén alkalmazott technológiák fejlesztésének elősegítése érdekében. Végső célunk egy gépi tanuláson és fehérjeszerkezeten alapuló funkcionális predikciós szoftver kifejlesztése. Ennek elősegítése érdekében együttműködésbe kezdtünk a barcelonai Vall d'Hebron Kutatóintézet Prof. de la Cruz vezette csoportjával, amelynek kutatói a gépi tanuláson alapuló variánsosztályozás szakértői. Geometriai és energiaalapú jellemzők átfogó készletét dolgoztuk ki a natív és mutált fehérjeszerkezetek közötti különbségek megragadására. A geometriai alapú jellemzők közül kezdetben a Weissenow és munkatársai (2024) által kidolgozott megközelítést alkalmaztuk, amely a távolság négyzetes középérték deviancia (dRMSD) értékét használta a natív és mutáns struktúrák közötti szerkezeti torzulás számszerűsítésére. Ezt a módszert továbbfejlesztettük azzal, hogy a mutáció konkrét területére összpontosítottunk.

Kifejlesztettünk egy olyan funkciót is, amely méri a natív szerkezet relatív hozzáférhetőségi értékét, és ezt az információt a mutáns struktúra atomi koordinátáinak kinyerésére használja fel. Az energiaalapú jellemzőkhöz a Miyazawa–Jernigan-potenciál durva szemcséjű változatát alkalmaztuk, amelyet viszonylag egyszerű kiszámítani, és betekintést nyújt a fehérje stabilitásának változásába.

Ezeket a jellemzőket, valamint egy gondosan kiválasztott szekvenciaalapú jellemzőkészletet alkalmaztunk egy XGBoost-alapú gépi tanulási modell képzésére. Jellemzőink kiértékeléséhez ezt a modellt teszteltük az ornitin-transzkarbamiláz (OTC, P00480) fehérjén, prototípusként. A kifejlesztett modell teljesítményét a Matthew-féle korrelációs együttható (MCC), a pontosság, a visszahívás és a precizitás segítségével értékeltük.

Kezdeti eredményeink azt mutatják, hogy a strukturális alapú jellemzők bevonása 20,69%-kal növeli az MCC-t és 7,59%-kal a pontosságot. Ezek az eredmények arra utalnak, hogy e jellemzők beépítése jelentősen javíthatja a predikciós algoritmusok teljesítményét. Célunk ezért az, hogy ezeket a jellemzőket gépi tanulási modellek képzéséhez használjuk fel, és megvizsgáljuk, hogy milyen hatással vannak az algoritmus általános hatékonyságára és teljesítményére.

1. American Association for Cancer Research (AACR). (n.d.). Understanding cancer development. In AACR Cancer Progress Report. Retrieved July 13, 2024, from https://cancerprogressreport.aacr.org/disparities/chd20-contents/chd20-understanding-cancer-development/#:~:text=Alterations%20in%20the%20DNA%20sequence,arise%20in%20the%20daughter%20cells.

2. Vears DF, Sénécal K, Borry P. Reporting practices for variants of uncertain significance from next generation sequencing technologies. Eur J Med Genet. 2017;60(10). doi:10.1016/j.ejmg.2017.07.016

3. Hoffman-Andrews L. The known unknown: The challenges of genetic variants of uncertain significance in clinical practice. J Law Biosci. 2017;4(3). doi:10.1093/jlb/lsx038

4. Ioannidis NM, Rothstein JH, Pejaver V, et al. REVEL: An Ensemble Method for Predicting the Pathogenicity of Rare Missense Variants. Am J Hum Genet. 2016;99(4):877-885. doi:10.1016/j.ajhg.2016.08.016

5. Qorri E, Takács B, Gráf A, et al. A Comprehensive Evaluation of the Performance of Prediction Algorithms on Clinically Relevant Missense Variants. Int J Mol Sci. 2022;23(14). doi:10.3390/ijms23147946

6. Gunning AC, Fryer V, Fasham J, et al. Assessing performance of pathogenicity predictors using clinically relevant variant datasets. J Med Genet. 2021;58(8):547-555. doi:10.1136/jmedgenet-2020-107003

7. Jumper J, Evans R, Pritzel A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. Nature. 2021;596(7873). doi:10.1038/s41586-021-03819-2

8. Özkan S, Padilla N, de la Cruz X. QAFI: A Novel Method for Quantitative Estimation of Missense Variant Impact Using Protein-Specific Predictors and Ensemble Learning, 07 May 2024, PREPRINT (Version 1) available at Research Square [https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-4348948/v1]

9. Zhong B, Su X, Wen M, Zuo S, Hong L, Lin J. ParaFold: Paralleling AlphaFold for Large-Scale Predictions. In: ACM International Conference Proceeding Series. ; 2022. doi:10.1145/3503470.3503471

Tengelysúlymérés hídra telepített nyúlásmérő bélyegek adatai alapján



Szinyéri Bence a BME Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszéken doktorandusz hallgató. Kutatási témája a mélytanulási (deep learning) algoritmusok alkalmazása.

Kővári Bence a BME Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszéken egyetemi docens. Főbb kutatási területei a mesterséges intelligencia algoritmusok alkalmazása az automatizált aláíráshitelesítés, képfeldolgozás és jelfeldolgozás területén.

Völgyi István a BME Építőmérnöki Karán doktorált. Jelenleg a Hidak és Szerkezetek Tanszék docense, a Szerkezetvizsgáló Laboratórium laborfejlesztési vezetője. Kutatási területei a vasbeton rúdszerkezetek és a hosszútávú tartószerkezeti méréseken alapuló szerkezeti diagnosztika.

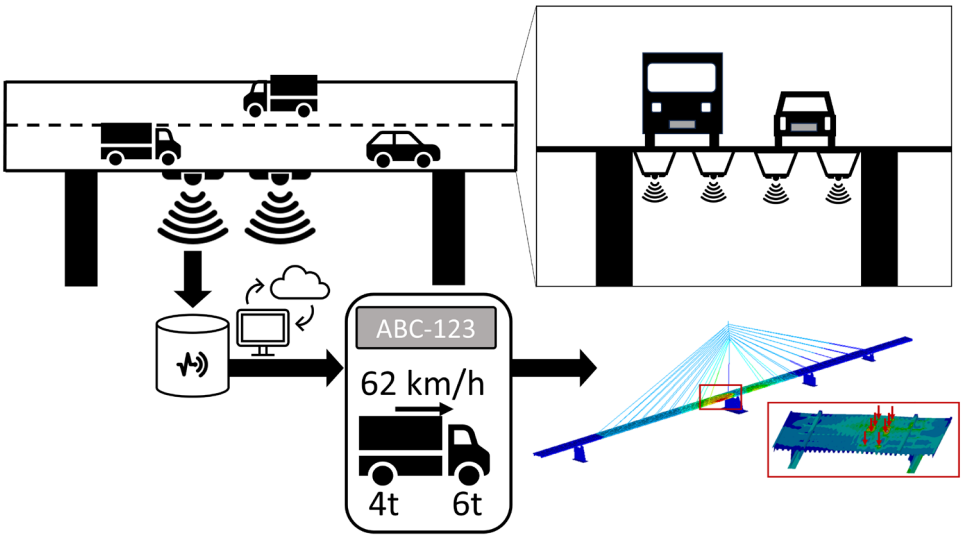
Kollár Dénes a BME Hidak és Szerkezetek Tanszéken adjunktus. Főbb kutatási területei a hegesztési eljárások numerikus modellezése és numerikus módszereken alapuló szerkezeti analízis.

Joó Attila László a BME Hidak és Szerkezetek Tanszéken egyetemi docens. Korábban a BME Építőmérnöki Karának (ÉMK) gazdasági dékánhelyettese és a BME Felsőoktatási Innovációmenedzsment és Együttműködési Központ (FIEK) igazgatója. Főbb kutatási területei a vékonyfalú acélszerkezetek, földrengésre történő méretezés, valamint az építőipari digitalizáció és azon belül tartószerkezetek digitális ikreinek kutatása.

A hidak állapotának nyomon követése fontos feladat az azt üzemeltető mérnökök számára. Amennyiben nyomon tudnánk követni a hidakat érő különböző hatásokat, akkor az segítené a karbantartási feladatok ütemezését, és a hidak állapotáról valós időben lehetne tájékozódni. Egy ilyen, úgynevezett digitális ikerpár létrehozása kutatócsoportunk célja. A hidat érő hatások közül az egyik legjelentősebb a hídon áthaladó forgalom által gerjesztett hatások. A forgalomból is elsősorban a nehéz, illetve túlterhelt járművek és az azokon lévő tengelyek szerepe jelentős a híd fáradása szempontjából. Így a digitális ikerpár létrehozásának részfeladata egy tengelysúlymérő rendszer megalkotása.

Célunk egy olyan tengelysúlymérő rendszer létrehozása, amely a hídra telepített nyúlásmérő bélyegek adatai alapján működik. Ezeket a rendszereket Bridge Weigh-in-Motion (BWIM) rendszereknek is nevezik. Egy ilyen rendszer rövid és hosszú távú hasznot is hoz. Rövid távon a túlterhelt járművek kiszűrésére lehet használni, míg hosszabb távon a híd állapotáról kaphatunk számokkal alátámasztott jelentéseket, riasztásokat.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Építőmérnöki Kara (ÉMK), valamint Villamosmérnöki és Informatikai Kara (VIK) kutatóiból alakult kutatócsoportunk egy ilyen tengelysúlymérő rendszer prototípusát dolgozta ki a komáromi Monostori hídon. A megoldás alapja egy szimulációs eljárás. Amennyiben egy ismert pályájú, ismert járműparaméterekkel rendelkező jármű halad át a hídon, akkor a hídban mérhető nyúlásértékek egy végeselemes szimuláció segítségével kiszámíthatóak. Ennek a feladatnak az inverzét kell megoldanunk, tehát a hídon mért nyúlásadatokból kell kiszámítani az eredeti tengelysúlyokat. Mindezt úgy, hogy a járművek több sávban is közlekedhetnek. Itt jön képbe a mesterséges intelligencia: egy mélytanulás-alapú algoritmus végzi el ezt az inverz feladatot. Ezek a tanítások igényelnek olyan számítási kapacitásokat, ahol a KIFÜ HPC-infrastruktúrája hasznos számunkra.



A Bridge Weigh-in-Motion rendszerben futó folyamatok

Az eddigi helyszíni mérések bizonyították, hogy a jelenlegi rendszer képes az összsúly- és tengelysúlybecslés hibái alapján a tengelysúlymérés területén elterjedt COST 323 szabvány szerinti „A" (legjobb) minősítést elérni.

További terveink között szerepel a járműforgalom adatainak integrálása a híd digitális ikerpárjával. A járműforgalom ismeretében, a megfelelő számítások elvégzése után a híd állapotát annak digitális ikerpárján keresztül lehet majd nyomon követni valós időben. Emellett további célunk a megoldás általánosítása is, hogy a rendszer több hídtípusra is könnyedén telepíthető lehessen.

A kutatás az Európai Unió által támogatott Mesterséges Intelligencia Nemzeti Laboratórium (RRF-2.3.1-21-2022-00004) projekt keretében valósul meg.

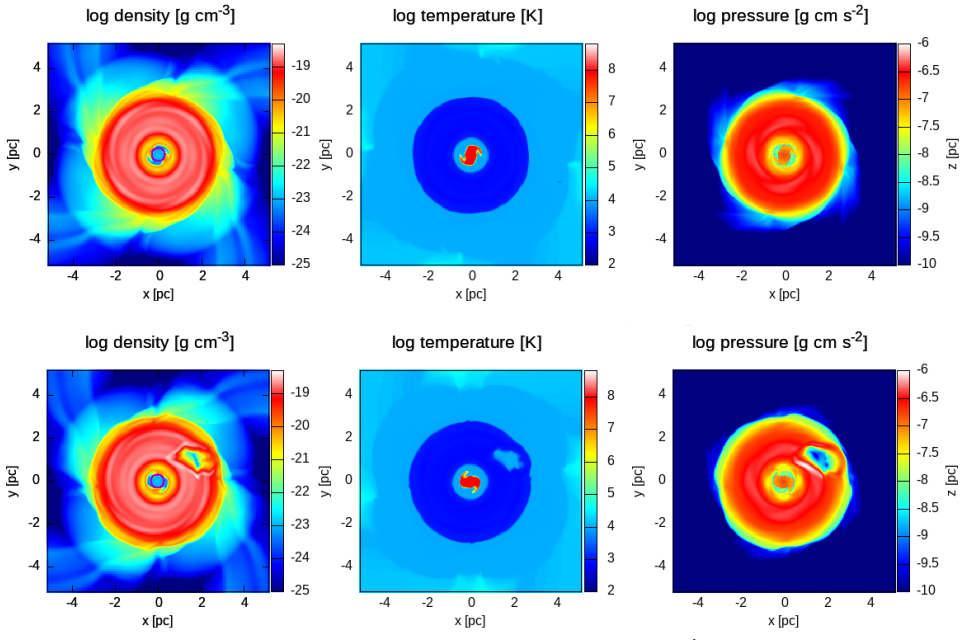
A Szupercsapat: szupernóvák a szupernagy tömegű fekete lyukak közelében



Dr. Barna Barnabás, a Szegedi Tudományegyetem tudományos munkatársa. Elsődleges kutatási területe a termonukleáris szupernóvák eredete, valamint az általuk történő távolságmérés. Ehhez társult prágai tartózkodása során a szupernóvák környezetükre gyakorolt hosszú távú hatásainak vizsgálata, amelynek hidrodinamikai szimulációihoz előbb cseh, majd magyar szuperszámítógépeket használt.

A szupernóvák az Univerzum legnagyobb energiafelszabadulással járó eseményei. A szupernagy tömegű fekete lyukak (supermassive black hole, SMBH) az Univerzum legerősebb gravitációs terével bíró objektumai. Mi történik, ha ezek a gigászi erők találkoznak? Erre keresi a választ kutatási projektünk, amely 2020-ban kezdődött a Cseh Tudományos Akadémia Csillagászati Kutatóintézeténél töltött első posztdoktori évem során. Az SMBH-k minden óriásgalaxis centrumában megtalálhatóak, így Galaxisunkban, a Tejútrendszerben is: a Sgr A* névre hallgató monstrum a Napunk tömegének négymilliószorosával bír – és ezzel még kispályásnak számít a saját kategóriájában! Az SMBH-k felfedezése óta nyitott kérdés, miként nőhettek ilyen nagyra, a jelenlegi megfigyelések ugyanis viszonylag lassú tömegnövekedést mutatnak a galaxisok centrumában lévő fekete lyukak esetében.

Projektünk egyik hipotézise alapján a csillagrobbanások, azaz a szupernóvák jelentős szerepet játszhatnak az SMBH-k fejlődésében. A galaxisok központi régiójában nemcsak a csillagközi gáz és por, hanem a nagy tömegű csillagok sűrűsége is magas, ami viszonylag gyakori szupernóva-robbanásokhoz vezet. A felszabaduló óriási kinetikus energia nyomán a szupernóvák lökéshulláma összesöpri a csillagközi gázokat, majd annak lassulását követően „egyben" juttathatja el a gravitációs kút mélyére, vagyis a fekete lyuk közvetlen közelébe. Ilyen módon magyarázhatóvá válnának az egyes SMBH-k tömegnövekedései közti különbségek, valamint az a tény, hogy a Sgr A* jelenleg nem mutat jelentős aktivitást.

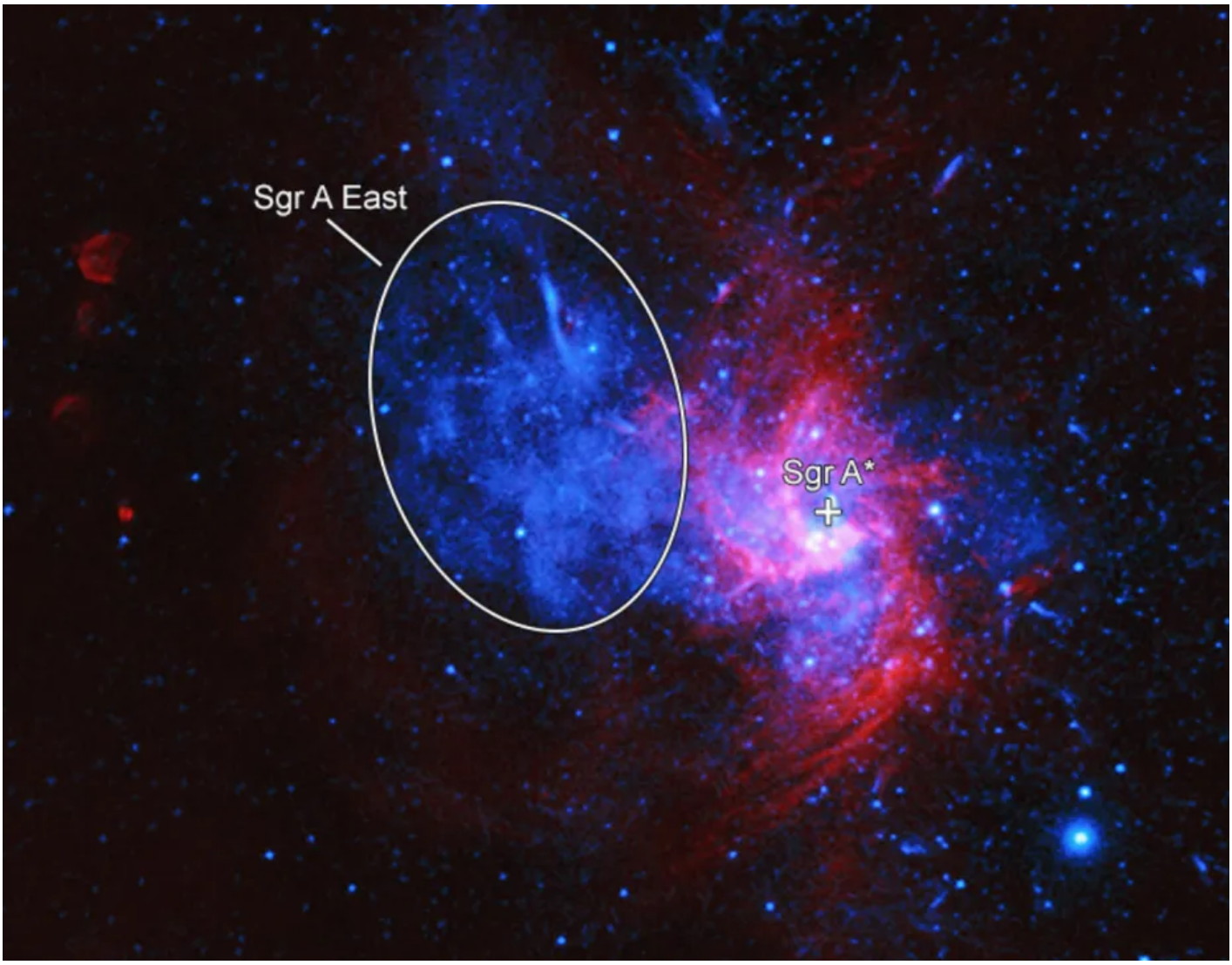


1. ábra: *Az SMBH körüli cirkumnukleáris anyagkorong fizikai jellemzői a keringési síkban a robbanás előtt (felső sor), valamint tízezer évvel a robbanás után (alsó sor). A szupernóva-maradvány tágulása minden irányban összesűrűsíti a korong gázanyagát. Forrás: Barna et al. In prep.*

Mivel a Galaxis centrumához közeli szupernóva-robbanástól az összesöpört anyagfelhő fekete lyukba spirálozódásáig akár több százezer év is eltelhet, a folyamat nem vizsgálható közvetlen megfigyelések révén. Kollégáimmal ezért olyan hidrodinamikai szimulációkat fejlesztettünk, amelyek realisztikusan modellezik az SMBH környezetében zajló folyamatokat, de kellően egyszerű közelítéseket tartalmaznak ahhoz, hogy akár tucatnyi különböző forgatókönyv szerint is futtatható legyen a modell. A nagy részletességű szimulációk (30 × 30 × 30 fényéves térfogat 0,1 fényéves felbontással) így is csak olyan szuperszámítógépes környezetben valósíthatók meg, mint amilyen a Komondor HPC.

Korábbi kutatómunkánk során sikerült megmutatni, hogy a Galaxis centrumának dinamikai tulajdonságait alapul véve, és egy közel homogén sűrűségű környezetet feltételezve egy-egy szupernóva akár több ezer naptömegnyi gázt tud a központi fekete lyukhoz szállítani. A későbbiekben különböző összetételű központi csillaghalmazokat alapul véve erős kifúvásokat, ún. csillagszelet adtunk hozzá a modellekhez, amelyek ugyanakkor képesek voltak szinte teljesen megakadályozni a szupernóva-maradványok befelé irányuló anyagtranszferét. A jelenleg vizsgált modelljeinkben az SMBH körüli több fényév átmérőjű, sűrű gázstruktúrával, az ún. cirkumnukleáris koronggal bővítettük a hidrodinamikai szimulációnkat, amely a feltételezések szerint a centrumból származó csillagszél ellenére is fenn tudja tartani a csillagközi gáz SMBH felé spirálozását, egy szupernóva esetében pedig ez a folyamat akár jelentősen fel is erősödhet.

Végeredményben pedig úgy tűnik, sok minden függ attól, hol bukkan fel a szupernóva az anyagkorongban. Némely robbanási helyszín kifejezetten akadályozza az SMBH felé áramló anyagfolyamot (mivel a robbanás kvázi „elfújja" az anyagkorong jelentős részét), más esetekben viszont képes felerősíteni azt (akár több száz naptömegnyi gázt „tolva" a centrum felé). Hogy melyik a domináns folyamat, azt csak több szimulációra alapuló statisztika alapján fogjuk tudni megbecsülni – ezek a számítások jelen sorok írása közben is futnak a Komondoron. Az azonban egyre biztosabbnak tűnik, hogy a csillagrobbanások jelentős hatással vannak az SMBH-k fejlődésére, a fekete lyukak körüli aktivitás fokozódása pedig valószínűsíthetően a csillagrobbanások közvetett hatásának tudható be.

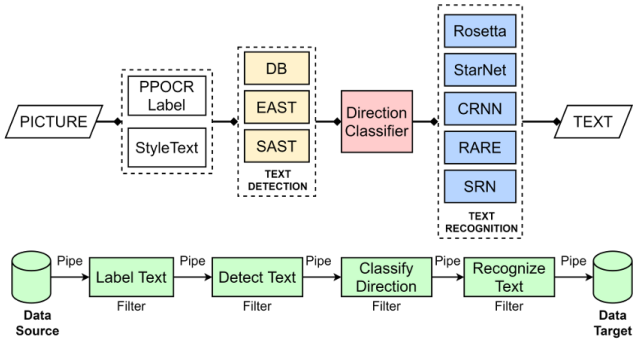


2. ábra: *A Sagittarius A East szupernóva-maradvány az Sgr A* szupernagy tömegű fekete lyuk közelében, a Tejútrendszer centrumában. Forrás: NASA / CXC / Nanjing University / Zhou et al. / NSF / NRAO / VLA*

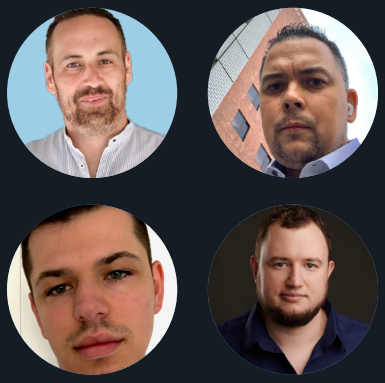
Szintetikus nyelvtanítás HPC-környezetben

Az ITware a COVID–19 világjárvány alatt egy japán–angol–magyar hibrid nyelvi modellen kezdett el dolgozni egy japán partnerével. A cél egy kombinált nyelv létrehozása volt, amely a mindennapi szoftverfejlesztéseinket és egyéb mérnöki területeket is képes támogatni, dedikált OCR-rel támogatott alkalmazásokon keresztül. A pontosság mellett kritikus volt a valósidejűség is: például japán nyelven írt, de angol kifejezéseket és ábrákat is tartalmazó műszaki dokumentációk olvasás közbeni fordítása. A tanításokat saját, dedikált AI-fejlesztő környezetekben kezdtük, azonban viszonylag gyorsan ki is nőttük ezeket, a japán–magyar–angol ábécék kombinációjából fakadó kihívásoknak köszönhetően.

A pilotprojektünk nagyvonalú célja az volt, hogy egy nagy teljesítményű, elosztott számítási környezetben, a HPC-infrastruktúrában optimalizáljuk és gyorsítsuk az optikai karakterfelismerő (OCR) modellek tanítását (lásd: alkalmazott architektúra), illetve a hozzá kapcsolódó adatszettek generálását. Azt szerettük volna elérni, hogy a rendelkezésre álló erőforrások maximális kihasználásával, különösen a GPU-k (tanítások esetén) és a CPU-k (adatszett-generálás, finomhangolás, optimalizálás esetén) hatékony alkalmazásával jelentősen javítsuk a modellek tanulási sebességét és teljesítményét.



A Paddle architektúra ábrája. A mi esetünkben a szövegfelismerés CRNN-nel történt.



Az ITware 2001 óta a szoftverfejlesztés élenjáró szereplője a régióban, sokrétű, nagyvállalati rendszerekhez és AI-fejlesztésekhez kötődő tapasztalattal. Több mint 60 munkatársa a mesterséges intelligencia és a full-stack fejlesztések területén alkot egyedi megoldásokat.

Zentai Ármin: szoftver architekt, vezető fejlesztő, a komplex infrastruktúrák szakértője. Ő „Magyarország legsokoldalúbb fejlesztője", innowwide a szó szoros értelmében. A verseny többszörös nyertese. Részt vett a Komondor béta tesztelésében és közben igazi HPC-specialistává vált az OCR projekt során.

Bessenyei Péter: szoftver architekt, vezető fejlesztő, AI-oktató. Több mint 20 éve dolgozik az egyedi szoftverfejlesztésben, mely során számos projektben a legkülönbözőbb technológiákkal dolgozott. A BME-n villamosmérnöki mesterfokozatot, valamint Stanford Machine Learning és Certified Scrum PO oklevelet szerzett. Az AI4DEV program oktatója.

Turcsányi Martin: AI-fejlesztő, tesztautomatizáló. Gazdaságinformatikus, üzleti adatelemző, jelenleg az Óbudai Egyetem adattudomány mesterszakos hallgatója. Fő érdeklődési területei közé tartoznak különböző LLM-modellek, computer visionnel kapcsolatos témák, az NLP, adatmodellezések, a szoftverarchitektúrák felépítése és az automatizált tesztelés.

Biró Attila: CTO, üzletfejlesztési vezető, kutató. Villamosmérnök MSc automatika és ipari informatika szakirányon. Több mint 20 éve vezet komplex hazai és nemzetközi projekteket, melyek mellett innovációmenedzsmenttel és japán/nemzetközi üzletfejlesztéssel foglalkozik. A mesterséges intelligenciához kapcsolódóan kutató több egyetemen, PhD-hallgató az informatika, illetve az egészségügy területén.

A szintetikus (JP–EN–HU–IT) nyelvtanító projekt során számos kihívással szembesültünk a projektet megelőző két évben, saját számítógépes környezeteinkben. A legnagyobb ezek közül az volt, hogy a saját eszközeinken az adatgenerálás és a modellek tanítása rendkívül lassan haladt. Egy 50 millió képből álló adatszett elkészítése akár egy hetet is igénybe vett, míg a modellek tanítása több hetet is elvett az időnkből. Továbbá a fejlesztési módszertanunkat és időbeosztásunkat is úgy kellett megtervezni, hogy a tanítások és az adatgenerálások futtatását éjszakára és hétvégére ütemezzük, hogy minél kevesebb holt időt eredményezzen az, hogy ezen műveletekre várunk. A rendelkezésre álló erőforrások – mint a CPU-szálak, a RAM- és GPU-kapacitás – nem

voltak elegendőek ahhoz, hogy a nagy volumenű OCR-projekteket hatékonyan végrehajtsuk. Ráadásul a több GPU párhuzamos használata, ami kulcsfontosságú volt a gyorsabb eredmények eléréséhez, nem volt egyszerűen megvalósítható. Ezek végül arra késztettek minket, hogy a Komondor HPC-infrastruktúrát válasszuk a munkánkhoz.

Mit tudtunk a HPC-környezetről? Nem sokat. Mennyi tapasztalattal rendelkeztünk? Gyakorlatilag nullával. Erős szakmai háttérrel érkeztünk, de annál is nagyobb lelkesedéssel, motivációval. Ma már tudjuk: ahhoz, hogy hatékonyan tudj dolgozni egy OCR-es gépi látás projekten HPC-környezetben, több előfeltételnek is teljesülnie kell. Ezeket érdemes szem előtt tartani, hogy megkíméljük magunkat a többletkiadásoktól és jó adag frusztrációtól.

Először is, alaposan ismerned kell a HPC-rendszerek működését és architektúráját, beleértve a párhuzamos és elosztott számítási modelleket, valamint a klaszterek erőforrás-kezelését és ütemezését (például a Slurm ütemezőt). Ha nem ismered, akkor legyen, aki folyamatosan támogat és/vagy késztet arra, hogy megismerd és megtanuld ezeket. Fontos, hogy jártas légy a használt deep learning keretrendszerekben – mint például a TensorFlow, PyTorch (esetünkben az OCR-re szakosodott PaddlePaddle) –, és tudd, hogyan kell ezeket optimalizálni és skálázni több GPU-n, CPU-n futó környezetben, amelyek ráadásul több fizikai gépre is el vannak osztva.

Ezen túlmenően, képesnek kell lenned hatékonyan kezelni és előkészíteni a nagy méretű adathalmazokat. Ez magában foglalja az adatok megfelelő formátumú tárolását és betöltését (például LMDB vagy HDF5 használatával), valamint az IO-műveletek optimalizálását a rendszer teljesítményének maximalizálása érdekében. Ismerned kell az adattárolási korlátokat és kvótákat is, hogy elkerüld a fájlkezelési problémákat, és tudd, hogyan lehet az adatokat szükség szerint archiválni és újragenerálni.

A szoftveres környezetek és függőségek kezelése szintén kritikus fontosságú. Biztosítanod kell a használt könyvtárak és keretrendszerek kompatibilitását a HPC-infrastruktúra által támogatott verziókkal, beleértve a CUDA és cuDNN verziókat is, mivel ezek adottak, és nincs lehetőség más verziót telepíteni. Emellett célszerű ismerni a HPC-környezetben használt konténerizációs technológiákat, mint például a Singularity, mivel eléggé korlatozottak a jogosultságaid, és nincs lehetőséged új csomagok telepítésére vagy a meglévők frissítésére ezen megoldások nélkül. A hibakeresés és teljesítményoptimalizálás szempontjából elengedhetetlen, hogy képes legyél monitorozni a futó folyamatokat, és használni a megfelelő eszközöket és metrikákat a rendszer teljesítményének értékeléséhez.

Végül, de nem utolsósorban, fontos a megfelelő előkészítés és tesztelés kisebb adathalmazokon és helyi környezetben, mielőtt a teljes méretű adatokkal és a teljes HPC-infrastruktúrával dolgoznál. Már a helyi környezetben is érdemes több fizikai gépen, több GPU-t és CPU-t használva futtatni, letesztelni és optimalizálni a folyamatot. Ez segít az esetleges problémák korai azonosításában és a munkafolyamatok finomhangolásában, ami hosszú távon időt és erőforrásokat takarít meg.

Összességében tehát: HPC-környezetben zajló sikeres munkavégzéshez szükség van technikai szakértelemre a rendszerek és eszközök terén, alapos tervezésre és előkészítésre, valamint rugalmasságra és problémamegoldó képességre a felmerülő kihívások kezelésében. Az erős alapok mellé a HPC Kompetencia Központ szakemberei nyújtanak felhasználói támogatást. Mi a béta tesztelési szakaszban csatlakoztunk, így nálunk a tanulási görbe hosszabb és érdekesebb volt, mint általában szükséges, viszont mélyebben megismertük a rendszer adottságait, mint előzetesen terveztük.

A pilotprojekt során jelentős időmegtakarítást és teljesítményjavulást értünk el, beleértve az adatszettek generálási idejének drasztikus csökkentését és bizonyos modellek eredményeiben akár 30–40%-os javulást. Ezek az eredmények világosan mutatják, hogy a HPC-környezetre való átállás rendkívül előnyös volt, mind időben, mind a modellek minőségében. Összességében a HPC-környezet választása elengedhetetlen volt a projekt sikeres és hatékony végrehajtásához, mivel a saját környezetekben tapasztalt nehézségek túlságosan korlátoztak minket.

Párhuzamos multi-GPU-algoritmusok fejlesztése agyi EEG-adatok feldolgozásához






Dr. Juhász Zoltán habilitált egyetemi docens a Pannon Egyetem Villamosmérnöki és Információs Rendszerek Tanszékén. Több évtizedes oktatói és kutatói tapasztalattal rendelkezik a párhuzamos rendszerek és programozás területén. Számos hazai és nemzetközi kutatási projekt vezető kutatója volt, amelyekben PC-klasztereket, GPU-kat, felhőrendszereket és szuperszámítógépeket használtak. Kutatása jelenleg a párhuzamos algoritmusok tervezése és implementálása, valamint a teljesítmény optimalizálása olyan tudományos számítási problémák számára, mint az orvosbiológiai jelfeldolgozás és a plazmaszimuláció.

Zeyu Wang orvosbiológiai mérnök (MEng, 2021, Shenyang University of Technology, P.R. China). A Pannon Egyetem utolsó éves PhD-hallgatója. Fő kutatási területe a GPU-számítástechnika, az EEG-jelfeldolgozás és -adatelemzés, a jel-dekompozíciós módszerek és a gépi tanulási algoritmusok. PhD-kutatásában EEG-dekompozíciós módszereket és azok hatékony, nagy teljesítményű, egy és több GPU-s implementációit tanulmányozza.

Iffah Syafiqah MSc-diplomát szerzett idegtudományból az Universiti Sains Malaysián (USM, 2021), és jelenleg a Pannon Egyetem Stipendium Hungaricum ösztöndíjas PhD-hallgatója. Doktori kutatása az agyi oszcillációkat vizsgálja különböző EEG-technikák (esemény kiváltott potenciál, idő-frekvencia és független komponens elemzések) segítségével, a fázisszinkronizációra és a konnektivitási hálózatok elemzésre összpontosítva. Munkája célja, hogy elősegítse az agyi hálózatok dinamikájának jobb megértését és annak a szerepét az olyan kognitív folyamatokban, mint például a korai vizuális feldolgozás, a vizuális művészet észlelése és a neurolingvisztika.

Tóth Bálint a Pannon Egyetem Informatikai Karának utolsó éves programtervező informatikus MSc-hallgatója. Kutatási területe a párhuzamos számítástechnika, a GPU-algoritmusok és az objektumorientált programozás. Az EEG-GPU-algoritmusokkal kapcsolatos munkáját 1. díjjal jutalmazták a 2024-es egyetemi TDK-konferencián.

A szuperszámítógépek a modern tudomány és innováció nélkülözhetetlen eszközei. Európa globális technológiai pozíciójának erősítése érdekében, az elmúlt néhány évben az EuroHPC program[1] keretében több nagy teljesítményű szuperszámítógép került beüzemelésre az EU tagállamaiban. Ezek a számítógépek speciális gyorsítókártyák (GPU) százait, ezreit használják fel a másodpercenként több mint 10^{15} (milliószor milliárd) műveleti teljesítmény biztosításához. Ezt a hatalmas teljesítményt azonban csak olyan speciális programokkal lehet kihasználni, amelyek képesek több milliárd számítási lépést egyszerre, párhuzamosan végrehajtani. Kutatócsoportunk a legfontosabb EEG-feldolgozási módszerek számára fejleszt nagyfokúan párhuzamos algoritmusokat, multi-GPU-szuperszámítógépeken történő futtatásra.

Az EEG (elektorenkefalográfia) technológia egy olyan mérési technika, ami képes az agy bioelektromos aktivitását ezredmásodperces pontossággal regisztrálni. Emiatt az EEG fontos eszköz a kognitív idegtudományi és pszichológiai kutatásokban vagy olyan klinikai alkalmazásokban, mint az epilepszia vagy a szklerózis multiplex diagnózisa. Az EEG-adatok gyűjtése a fejbőrre helyezett elektródákon keresztül történik érzékeny analóg-digitális konverterek segítségével. A megfelelő térbeli felbontás eléréséhez, amely már elegendő pontosságot nyújt a mért aktivitások anatómiai helyeinek (forrásainak) meghatározásához, legalább 64, de inkább 128 vagy több elektródát ajánlatos használni.

Az EEG-kísérletek során keletkezett nagy mennyiségű adat tárolása mellett a kutatók számos kihívást jelentő számítási problémával is szembesülnek. Az EEG-adatok sok zajt és bioelektromos műtermékeket (szempislogás és -mozgás, izomzaj, szívműködés stb.) tartalmaznak, amelyeket az adatelemzés előtt el kell távolítani. Továbbá, az agy nagyon jó elektromos vezetőképessége miatt a fejbőrön mért elektromos térpotenciál nem közvetlenül az elektróda alatti területet jellemzi: a mért adat több egyidejűleg, de különböző helyeken megjelenő kortikális forrás hatásának eredője is lehet. A zaj és a műtermékek eltávolítása, valamint az eredeti kortikális források meghatározása rendkívül számítás- és időigényes feladat.

Az EEG-kutatóközösség főként MATLAB- és (újabban) Python-alapú EEG-feldolgozó szoftvercsomagokat (pl. EEGLAB[2], Fieldtrip[3], Brainstorm[4], MNE Python[5]) használ, amelyeket alapvetően a könnyű kezelés és gazdag funkcionalitás, nem pedig a nagy számítási sebesség jellemez. Emiatt a nagy felbontású EEG-adatok esetén

egy alany adatfeldolgozási ideje több órát is igénybe vehet, míg csoportos vizsgálatok esetén a végrehajtási idő egyetlen számítógépet használva elérheti akár a több napot is. Sajnos ezek a programcsomagok csak korlátozottan támogatják a párhuzamosságot, mivel eredetileg hagyományos CPU-architektúrákra tervezték őket, így emiatt nem tudják maximálisan kihasználni a modern párhuzamos számítógépek – mint pl. a nagyfokúan párhuzamos, GPU (grafikus processzor) gyorsított szuperszámítógépek – adta lehetőségeket.

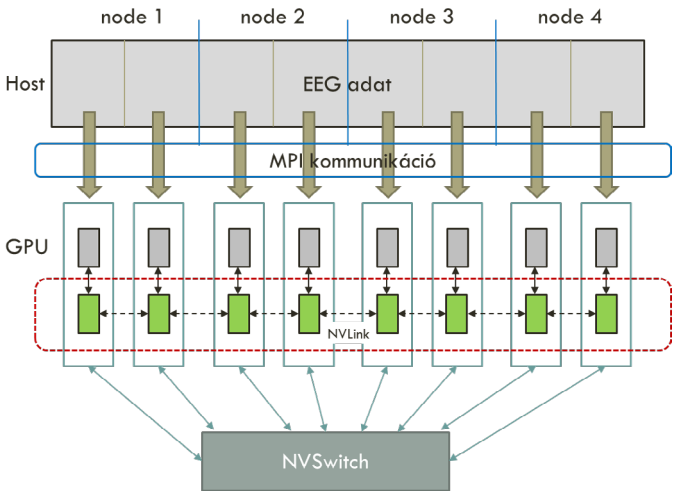
Kutatásunk célja olyan, csak GPU-kat használó EEG-feldolgozási programok létrehozása, amelyek képesek egyszerre több száz vagy akár több ezer GPU-n is futni, és ennek eredményeként több napról néhány percre csökkenteni a csoportszintű adatelemzési időket. Ellentétben a szokásos MATLAB-alapú módszerfejlesztésekkel és a funkciógazdag EEG-feldolgozó szoftverkeretrendszerek fejlesztésére irányuló törekvésekkel, mi a nagy számítási teljesítmény elérésére és a szuperszámítógépek maximális kihasználására fókuszálunk. Ez összhangban van az európai HPC-kutatások céljaival is.

A pre-exaflop (1017 művelet/s) tartományú szuperszámítógépekben elképesztő számú (106–108) számítási mag áll rendelkezésünkre. Mivel a legtöbb ma használt algoritmus nagyságrendekkel kisebb rendszerekre készült, új algoritmusokat és programozási technikákat kell kidolgozni, amelyek minimalizálják a memóriaműveletekre, adatkommunikációra és szinkronizálásra fordított időt. Ehhez újra kell gondolnunk számítástechnikai stratégiáinkat: át kell strukturálnunk vagy újra kell terveznünk az algoritmusokat, vagy új numerikus módszereket kell kidolgoznunk, amelyek alkalmasak ilyen nagy méretű rendszereken történő futtatásra. Ez a modern számítástechnika egyik nagy kihívása.

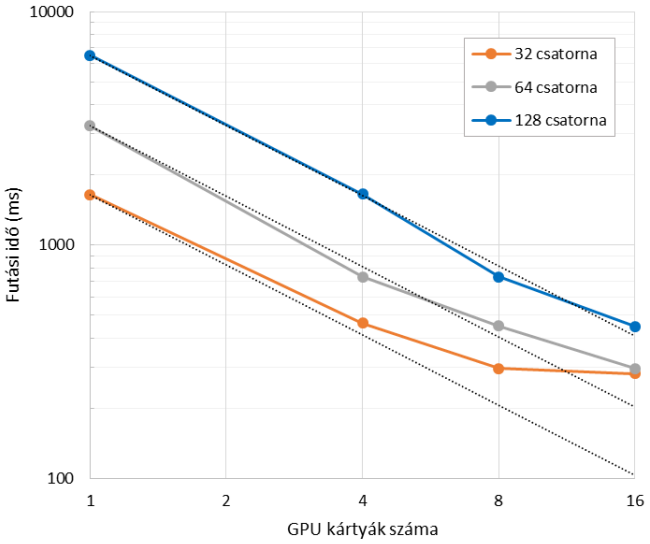
A mai napig számos fontos EEG-algoritmus GPU-változatát fejlesztettük ki, mint pl. a konvolúcióalapú jelszűrést, a spektrális teljesítménysűrűség-számítást, a rossz csatornák azonosítását és interpolációját, az áramforrás-sűrűség becslést[6], az Infomax Független Komponens Elemzés algoritmust[7], számos statisztikai jellemző kiszámítását, az Empirical Mode Decomposition[8] algoritmus különböző változatait és az agyi funkcionális konnektivitási hálózatok elemzéséhez használt kódrészleteket. Az implementációkat C/CUDA programozási nyelven fejlesztettük ki. A Komondor szuperszámítógépen, a GPU-partíció NVIDIA A100 GPU-kártyáin folytak az egy és több GPU-s fejlesztések, valamint az algoritmusok tesztelése és a teljesítményoptimalizálás. Az 1. ábrán látható a bemeneti EEG-adatok particionálása a multi-GPU-architektúra számára.

A munka során a Komondor számítógép CPU-partíciója is nagy hasznunkra volt, amelyen több MATLAB-alapú EEG-elemző pipeline-t tudtunk futtatni egyidejűleg, így 10–20-szoros gyorsulást érve el a csoportos EEG-elemzési feladatok végrehajtása során.

Jelenleg az elkészült algoritmusimplementációk skálázhatóságának tesztelése és egy konfigurálható előfeldolgozó GPU-pipeline létrehozása folyik. A 2. ábrán látható a Wavelet-transzformáció futási idejének alakulása és skálázhatósága multi-GPU-környezetben.



1. ábra: *Adatparticionálási stratégia a párhuzamos multi-GPU-algoritmus végrehajtáshoz*



2. ábra: *A Wavelet-transzformáció futási ideje különböző számú GPU-kártyán (adathossz = 65536, csatornánként 64 wavelet). Az ideális futási időt pontozott vonal jelzi. 128 csatorna esetén a skálázódás közelíti az elméleti értéket*

1. "Homepage - EuroHPC JU." https://eurohpc-ju.europa.eu/index_en (accessed Aug. 17, 2024).

2. A. Delorme and S. Makeig, "EEGLAB: an open source toolbox for analysis of single-trial EEG dynamics including independent component analysis," J. Neurosci. Methods, vol. 134, no. 2004, pp. 9–21, 2004, doi: 10.1016/j.jneumeth.2003.10.009.

3. R. Oostenveld, P. Fries, E. Maris, and J. Schoffelen, "FieldTrip : Open Source Software for Advanced Analysis of MEG, EEG, and Invasive Electrophysiological Data," Comput. Intell. Neurosci., vol. 2011, 2011, doi: 10.1155/2011/156869.

4. F. Tadel, S. Baillet, J. C. Mosher, D. Pantazis, and R. M. Leahy, "Brainstorm: A user-friendly application for MEG/EEG analysis," Comput. Intell. Neurosci., vol. 2011, no. January 2004, 2011, doi: 10.1155/2011/879716.

5. A. Gramfort et al., "MNE software for processing MEG and EEG data," Neuroimage, vol. 86, pp. 446–460, 2014, doi: 10.1016/j.neuroimage.2013.10.027.

6. F. Perrin, J. Pernier, O. Bertrand, and J. F. F. Echallier, "Spherical splines for scalp potential and current density mapping.," Electroencephalogr. Clin. Neurophysiol., vol. 72, no. 2, pp. 184–7, Feb. 1989, Accessed: Nov. 18, 2013. [Online]. Available: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0013469489901806.

7. A. J. Bell and T. J. Sejnowski, "An information-maximization approach to blind separation and blind deconvolution.," Neural Comput., vol. 7, no. 6, pp. 1129–1159, 1995, doi: 10.1162/neco.1995.7.6.1129.

8. N. E. Huang et al., "The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis," Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci., vol. 454, no. 1971, pp. 903–995, Mar. 1998, doi: 10.1098/rspa.1998.0193.

Hogyan lehetnek pontosabbak a meteorológiai előrejelzések?



Kardos Péter
Kutató-fejlesztő mérnök
MouldTech Systems Kft.

Kardos Péter 4 éve dolgozik a MouldTech Systems Kft. meteorológiai kutató-fejlesztő divíziójában. Több évtizedes tapasztalattal rendelkezik a meteorológiai szolgáltatásfejlesztés területén, amelyből közel 15 évig vezette Budapest Liszt Ferenc Nemzetközi Repülőtéren repülésmeteorológiai szolgáltatást nyújtó csapatot. Az egykor a HungaroControl szervezetében működő részleg az országban először állított elő neurális hálózatokkal támogatott nowcasting előrejelzéseket, és egyedülálló módon minőségirányítási rendszerbe integrált valós idejű verifikációs rendszert alakított ki. Az utóbbi években a numerikus alapon működő előrejelző rendszerek adatasszimilációs vizsgálataival foglalkozott, különös tekintettel a drónos mérések ezirányú felhasználására.

Az emberiséggel egyidős az időjárás megismerésének vágya. Nyilvánvalóan hatalmas előnyt jelent, ha tudjuk, hogy a következő órákban vagy napokban milyen időjárásra számíthatunk. Annak ellenére, hogy sok ember úgy érzi, hogy a meteorológusok továbbra is képtelenek pontos prognózissal szolgálni, a valóság az, hogy az elmúlt évtizedekben hatalmas fejlődésen ment keresztül a meteorológia, és azon belül is a numerikus időjárás-előrejelzés területe.

A 90-es években még az volt a fő kihívás, hogy a numerikusan készülő előrejelzések valódi időelőnnyel készüljenek el, magyarán a számítások közben futó virtuális idő gyorsabban pörögjön, mint a valóság. Ez nyilvánvalóan egy erős kompromisszumot jelentett a térbeli felbontás és a gyorsaság között, ugyanis minél részletgazdagabb volt a numerikus modell, annál számításigényesebb, és végeredményben annál lassabb volt a folyamat. A gyorsabb számítógépek fokozatosan teret nyitottak a nagyobb felbontású modellek számára, így a gyorsabb CPU-k és a numerikus modellek fejlődése kéz a kézben járt. Olyan gyors volt a processzorok fejlődése, hogy a 2010-es évek környékére a modellek már nem a számítási kapacitás szűkössége miatt nem tudtak fejlődni, hanem a fejlesztőknek egészen más típusú problémával kellett szembesülniük. Ez pedig az adathiány. Hiába növelték a felbontást, a modellek már nem adtak részletgazdagabb információt, mert kiderült, hogy a légkör kiindulási állapotát rekonstruáló mérési adatok erre elégtelenek.

Nyilvánvaló volt, hogy a továbblépéshez a numerikus modellek adatéhségét kell valamilyen módon enyhíteni. Több próbálkozás is született erre, például a légi járművek meteorológiai adatgyűjtése vagy a navigációs célú GNSS-jelek légköri kölcsönhatásán alapuló adatgyűjtések. Ezek hoztak ugyan némi javulást, de a fejlesztők további lehetőségek után kutatnak, amivel kitölthető a légkör alsó néhány km-es rétegében jelentkező adathiány.

Kutatócsapatunk 2011 óta foglalkozik az UAV-k, vagy népszerűbb nevükön a drónok meteorológiai alkalmazásának lehetőségeivel. A drónok képesek ugyanis valós időben a saját szenzoraikkal mért légköri adatokat továbbítani, sőt lehetőséget biztosítanak arra is, hogy az időjárás függvényében kijelölt adathiányos helyekről aktív mérések révén adjanak többletinformációt.

Az elmúlt két évben egy olyan meteorológiai mérődrónrendszert alakítottunk ki, amely képes operatív körülmények közötti folyamatos meteorológiai profilmérések elvégzésére, akár 2 500 m-es felszín feletti magasságig is mérve a hőmérsékletet, légnedvességet, légnyomást és szélparamétereket.

Munkánk során nagyon sok szakmai kérdés merült fel. Fel tudjuk-e használni ezeket a méréseket az előrejelzések pontosabbá tételéhez? Hogyan tudjuk beilleszteni a meglévő adatgyűjtő rendszerbe? Milyen gyakran szükséges mérni? Milyen magasságig? Milyen az ideális állomáshálózat-sűrűség?

Ahhoz, hogy ezekre a kérdésekre választ kapjunk, egy külön projektet indítottunk, amelynek alapja egy olyan numerikus előrejelzési rendszert szimuláló környezet, amely alkalmas arra, hogy nagy számban indítsunk benne szimulációkat. Erre több okból is szükség van. Egyrészt ahhoz, hogy érdemi vizsgálatot egyáltalán el tudjunk kezdeni, az előrejelzési területre el kell készítenünk egy hibastatisztikát, amely később abban nyújt segítséget, hogy egy mérést hogyan vegyünk figyelembe akkor, amikor egy időjárási mezőt szeretnénk feljavítani a segítségével. Ha elkészült a hibastatisztika, akkor már

vizsgálódhatunk a térbeli hatások tekintetében, vagy kiválaszthatjuk a mérés ideális feldolgozási módját. Végül természetesen arra is választ kapunk, hogy egy adott beállítás esetében milyen hatása van egyetlen drónos mérésnek, illetve a hálózatos, több drónos méréseknek mi a szerepe.

A szimulációs környezetünket konténertechnológiára alapozva építettük ki. A KIFÜ-vel kötött megállapodásunk, amely talán az egyik első kkv-s együttműködés volt, lehetőséget biztosított arra, hogy több HPC-platformon is teszteljük, fejlesszük a rendszerünket. Az ország legnagyobb kapacitású számítógépe, a Komondor üzembe helyezésével a lehetőségeink tovább bővültek, és az általa biztosított nagy CPU-kapacitás lehetővé tette, hogy a jelentős számítási igény ellenére hamar szülessenek eredmények.



A MouldTech Systems Kft. meteorológiai prototípusdrónjai, amelyek hazánkból egyedüliként vesznek részt a Meteorológiai Világszervezet által koordinált mérési kampányban.

Az eddigi kutatásaink során összesen több mint 16 000 db időjárási szimulációt futtatunk, amelyek mind 6-6 órás előrejelzési időtávból álltak. Az eredmények ismeretében látszik, hogy az általunk használt előrejelzési modell beállításai alapján az ideális drónhálózat sűrűsége legalább 30 km-es, tehát nagyságrendileg 20–30 mérődrónnal lehetne lefedni egész Magyarországot. A drónmérések hatása természetesen időjárásfüggő, és tisztán látszik, hogy korántsem egyenletes, de az egyértelműen kiderült, hogy egy-egy kritikus helyen és időben végzett mérés jelentős hozzáadott értékkel bír.

A kutatásunk itt természetesen nem ért véget, dolgozunk azon, hogy több drónnal egy időben végzett mérést is vizsgálhassunk, és a meteorológiai fejlesztések mellett még bőven van feladat mérnöki területen is.

A városi légszennyeződés szimulációja, általános célú HPC-portál és áramlástani megoldók fejlesztése





Környei László a Szegedi Tudományegyetemen végzett programtervező matematikusként és fizikusként, majd 2010-ben PhD-fokozatot szerzett. Az SZFKI-ban és az AUDI Hungáriánál is dolgozott HPC-környezetben. Jelenleg a Széchenyi István Egyetemen tanít, kutatása a légszennyezés modellezésére fókuszál.

Horváth Zoltán egyetemi tanár, 1989-ben végzett az ELTE-n matematikusként, PhD-fokozatát és habilitációját is ott szerezte numerikus matematikából. 2006 óta vezeti a Széchenyi István Egyetem Matematika Tanszékét, 2009-ben alapította a MathSO kutatócsoportot, 2013 óta a HU-MATHS-IN hálózat vezetője.

Bakosi József 1999-ben szerzett gépészmérnöki diplomát a Miskolci Egyetemen, majd 2008-ban PhD-fokozatot numerikus áramlástanból a George Mason Universityn. 20 évig mérnöki és kutatói munkát végzett, jelenleg a Széchenyi István Egyetemen HPC-szoftverfejlesztéssel foglalkozik.

Constans Mátyás tudományos matematikai programozó a Széchenyi István Egyetemen, több mint 8 év tapasztalattal GPU-programozásban, GPGPU és rendering területen. Jelenleg Navier–Stokes-egyenletek GPU-ra történő implementációjával foglalkozik MPI- és CUDA-technológiák használatával, low-level programozásra specializálódva.

Az áramlástani szimulációkkal végzett modellezések a számítógépes alkalmazások legnagyobb számítási igénnyel rendelkező feladatai közé tartoznak. Kutatócsoportunk alkalmazásai közül egy ipari (aeroakusztikai) és egy környezeti (városi levegőminőség monitorozása) alkalmazást mutatunk be, melyekhez a Komondoron végzett kódfejlesztés, benchmark és futtatás jelentős hozzáadott értéket képvisel. A cikkben bemutatott szoftverfejlesztés és alkalmazások nagy részben a HiDALGO2 EuroHPC projektjéből valósultak meg.[1]

A városi légszennyezettség magas szintje bizonyítottan az egyik legfontosabb kockázati tényező a szív- és érrendszeri betegségek kialakulásában, évente sok millió haláleset tudható be ennek.[2] Az EU légszennyezettségi mutatószámokat definiált, mint például az évenkénti, határértékeket meghaladó napok száma, melyek jelentése a tagországoknak kötelező. Az EU-ban dedikált munkacsoport alakult a jelentéseket modellezéssel támogató csoportok munkájának támogatására, ez a FAIRMODE[3], melynek mi is aktív tagjai vagyunk.

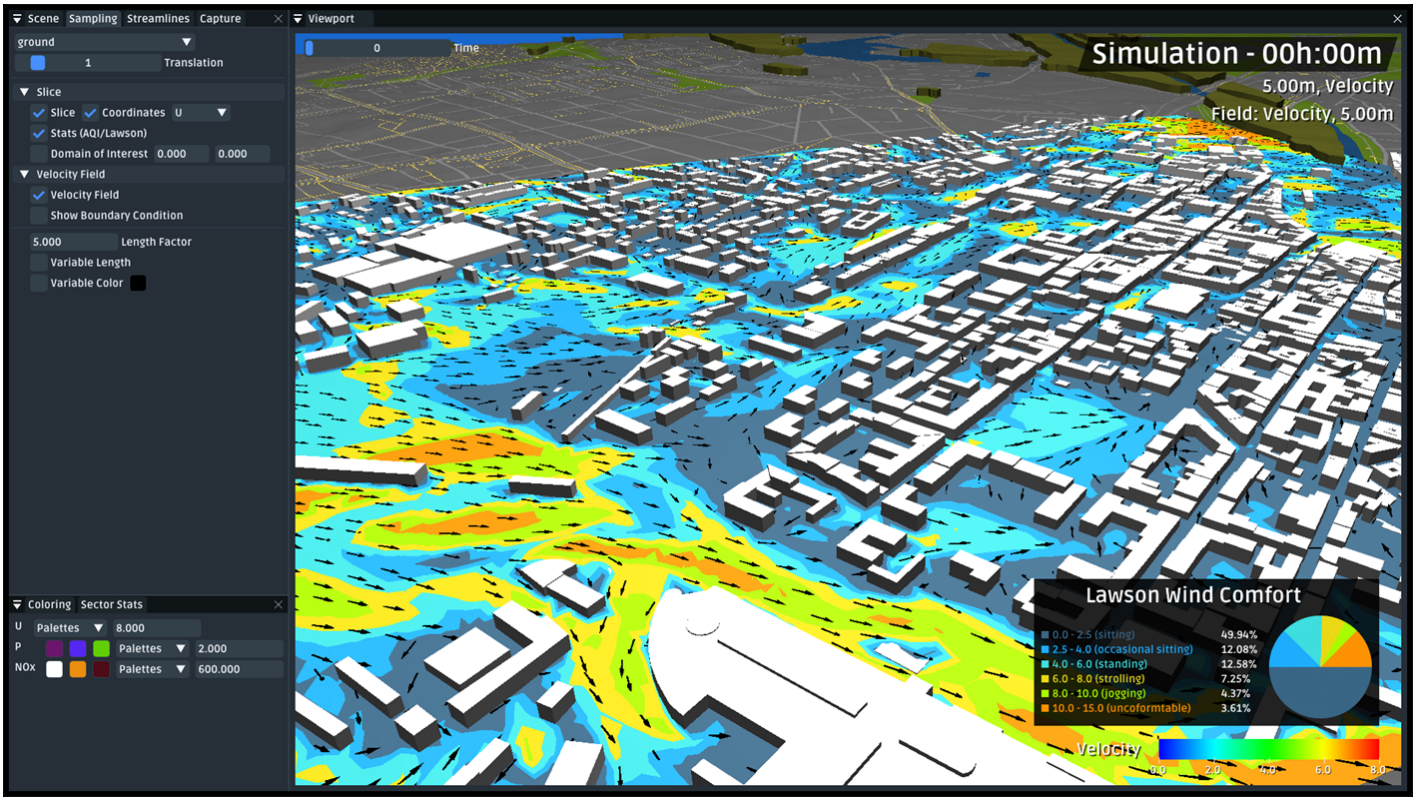
Kutatócsoportunk kifejlesztette az UAP (Urban Air Pollution) nevű, HPC-vel támogatott eljárást, amelyel tetszőleges, OpenStreetMapen szereplő városról tudunk 3D geometriát, majd ennek cellákra való felbontását generálni. Hosszabb modellezési időkhöz tartozó számításokban 10 M, validációhoz, benchmarkhoz 30–70 M cellával dolgozunk. A 10 M-s cellaszám utcaszinten 2-3 méteres felbontást enged meg. Ezután számítjuk a szél áramlását a 3D geometriában, globális szimulációkból származó peremfeltételekből, a tranziens Navier–Stokes-egyenletek turbulenciamodellezett (k- ε vagy k- ω) numerikus megoldásával, az OpenFOAM-alapú UAP-FOAM szoftver felhasználásával. Az UAP-FOAM mellett a RedSim, egy - az alapoktól kezdve teljesen saját fejlesztésű - natívan OpenMPI + CUDA-kódot[4], illetve a Xyst nevű, szintén saját fejlesztésű kódot[5] használjuk. A levegő áramlásának számítása után a szennyező anyagok pont-, vonal-, illetve tartományi forrásként való figyelembevétele, valamint időjárási adatok – mint a légköri határréteg-magasság, valamint a napsugárzási intenzitás – beépítése mellett oldjuk meg a diszperzió modellezésére a lineáris advekciós-diffúziós 3D differenciálegyenletet.

Az UAP-modellünket a FAIRMODE hackathonban alkalmaztuk, az Antwerpenre vonatkozó 2016. évi adatokra. Egyedüliként alkalmazva a HPC-technológiát, a Komondoron 2 hét alatt le tudtuk futtatni és ki tudtuk értékelni a hackathon feladatát, tranziens szimulációkkal egyedüliként. (Az eredményeket publikáló cikk hivatkozása a 6. lábjegyzetben található.)

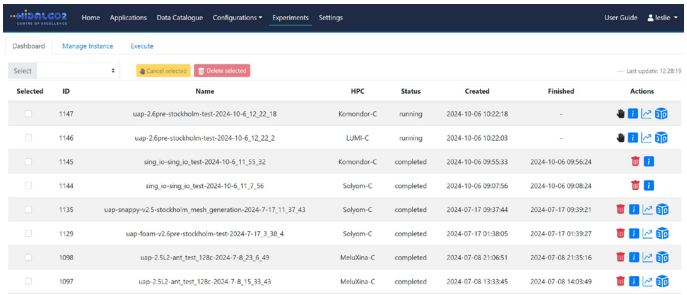
Az ipari áramlástani feladatok között az aeroakusztikai feladatok klasszikus, nehéz feladatot jelentenek. Kutatócsoportunk - ipari igény alapján - kiszámította az egy csőből nagy sebességgel kiáramló gáz

nyomásváltozása által keltett zajt. A feladat nehézségét jelzi, hogy a számításokkal nagyjából 5 Pa-nyi nyomásingadozást kell tudnunk helyesen kimutatni, amelyhez minimum 70 M cellán való futtatás volt szükséges.

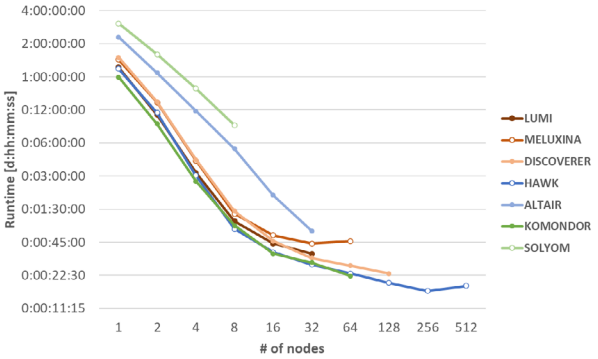
A számításokat a RedSim szoftverrel végeztük és céges, valamint egyetemi mérnökök mérési eredményeihez validáltuk.[7] Amikor az egyetemi NVIDIA V100S grafikus kártyánkon futtattuk a feladatot, 5 nap alatt kaptuk meg a megoldást – ipari környezetben ez a számítás a validáció idején (3 éve) több hetet vett igénybe. A Komondoron kapott hozzáférés segítségével multi-GPU-ra fejlesztettük a RedSim-et, amellyel 8x A100 GPU-n kb. 4-szer gyorsabb idő alatt futna le a kód a benchmark szerint.



1. ábra: *Városi légszennyeződés szimulációja UAP-FOAM segítségével, különböző HPC-rendszereken, 14 M cellás modell. Log-log skálán mutatjuk be a futásidőt egy óra szimulált időtartamra, különböző számú node-ok esetén, a Komondor, a HLRS Hawk és három EuroHPC gép esetére.*



2. ábra: *Városi szélkomfort számítása RedSim segítségével Győr városának 3D modelljében, Lawson-féle szélkomforteredmények két méter magasságú metszetben ábrázolva. A HPC-eredmények ábrázolása a csoport által fejlesztett CFDR-megjelenítővel történik közvetlenül a böngészőben, program telepítése nélkül.*



3. ábra: *A saját fejlesztésű MathSO portálon elindított szimulációk listája. A portál segítségével a Komondoron és EuroHPC-s gépeken, konténerizációs technikával történik a szimulációk futtatása és kiértékelése. A portál támogatja többek között a kétfaktoros azonosítást és a VPN-en keresztüli kapcsolódást is, az eredményeket pedig az integrált CFDR-megjelenítő segítségével szemléltetjük.*

1. https://www.hidalgo2.eu/
2. https://www.unicef.org/press-releases/air-pollution-accounted-81-million-deaths-globally-2021-becoming-second-leading-risk
3. https://fairmode.jrc.ec.europa.eu/
4. https://redsim.mathso.sze.hu/about/overview
5. József Bakosi et. al. „Complex-Geometry 3D Computational Fluid Dynamics with Automatic Load Balancing" in Fluids 8(5):147, DOI: 10.3390/fluids8050147
6. Fernando Martin et. el. „Using dispersion models at microscale to assess long-term air pollution in urban hot spots: A FAIRMODE joint intercomparison exercise for a case study in Antwerp" in Science of The Total Environment, Volume 925, 15 May 2024, 171761, DOI: https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.171761
7. Zoltán Horváth et. al. „Higly accura numerical solution of the Navier-Stokes equations in pipes." in Hu-Maths-In success stories of Mathematical short-term projects for Industry in 2017-2021 pp. 122

Szuperszámítógépekkel a mikrobiom-tervezés felé

Az orvosbiológia hatalmas mennyiségű adatot és információt termel, aminek a kiértékelése, elemzése nem valósítható meg nagy teljesítményű számítási kapacitás nélkül. Természetesen itt nemcsak az adatok mennyisége teszi nehézzé az elemzést, hanem azok összetettsége is; komplex modelleket szükséges létrehozni és alkalmazni ahhoz, hogy új információkat vagy ismereteket tudjunk kinyerni belőlük. Mi ezeknek az adatoknak a statisztikai vagy mesterségesintelligencia-vezérelt módon történő elemzésével foglalkozunk, és azon belül is elsősorban a genomikai adatokra fókuszálunk.

A jelenleg keletkező adatok túlnyomó része nukleotidszekvencia: szekvenálás révén meghatározható a DNS vagy az RNS, aminek segítségével a kromoszómák térbeli szerkezetére tudunk következtetni, meg tudjuk határozni a környezetünkben lévő nem tenyészthető mikroorganizmusokat, stb. A szekvenálás a gyakorlatban olyan mennyiségű adatot jelent, hogy ezeknek a nagy része jelenleg alulelemzett: sokkal több adat keletkezik, mint amennyit mi hatékonyan meg tudunk emészteni.

Kutatásaink során a mikrobiomra fókuszálunk, ami a mikroorganizmusok (baktériumok, vírusok, gombák, protozoák és mikroszkopikus algák) együttélése. Ezek az élőlények és közösségek, bár szemmel nem láthatóak, rendkívül fontos szerepet játszanak a mindennapi életünkben, akár a betegségekre, akár az ipari vagy egyéb biotechnológiai alkalmazásokra gondolunk. A mikroorganizmusok számos nehéz feladatot képesek megoldani, azonban ezt jellemzően több lépésben, gyakran egymással is koordinálva vagy éppen versengve teszik. Óriási változatosság jellemzi ezeket az élőlényeket, jelentős részüket még nem is fedeztük fel, ráadásul még az ismertek genomjában lévő fehérjék szignifikáns részéről sem sejtjük, hogy azok hogyan működnek, vagy mi lehet a feladatuk. Ebben a változatosságban komoly lehetőségek rejlenek: a mikrobiom segítségével és megértésével hatékonyan küzdhetünk patogének ellen, az egyre nagyobb gondot okozó antibiotikumrezisztencia ellen, vagy éppen ezek célzott felhasználása segíthet pl. műanyaglebontó baktériumközösségek létrehozásában.



A Neurális Bioinformatika Kutatócsoport (Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai és Bionikai Kar) tagjai:

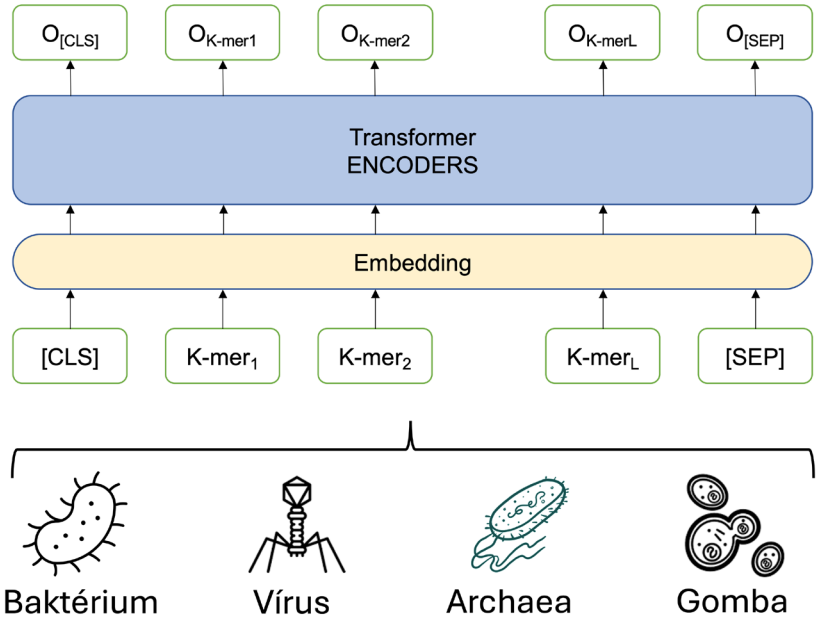
Bodnár Babett
Filyó Bendegúz
Juhász Judit
Krizsán Dániel
Ligeti Balázs

Ligeti Balázs a Pázmány Péter Katolikus Egyetem docense és a Neurális Bioinformatika Kutatócsoport vezetője. A csoport főként a bioinformatikára, különösen a mikrobiális genomikára és genomikus nyelvi modellek fejlesztésére összpontosít. Munkájuk során kifejlesztették a ProkBERT modellcsaládot, amely a mikrobiális szekvenciaelemzés kihívásaival, például a promóter-előrejelzéssel és a fágok azonosításával, felismerésével foglalkozik. Kutatásaik a gépi tanulás és a biológia eredményeit ötvözik annak érdekében, hogy hatékonyabb bioinformatikai eszközöket hozzanak létre, így lehetővé téve a célzott mikrobiom-tervezést.

Ilyen új alkalmazások kidolgozása azonban hagyományos kísérleti eszköztárral költséges és nehéz (pl. nem ismert, hogy hogyan tenyészthető egy adott baktérium). A mesterséges intelligencia megfelelő alkalmazásával viszont lehetséges virtuális kísérleteket végezni, folyamatokat és géneket optimalizálni, azaz különböző mikrobiom-tervezési feladatokat megoldani.

Mi neurális hálózatokkal, pontosabban genomikai nyelvmodellekkel közelítjük meg ezt a kérdést. Annak megértéséhez, hogy mi az a genomikai nyelvmodell, kicsit távolabbról kell indítanunk. Ahhoz, hogy például MI segítségével tudjuk elemezni a fent részletezett adatokat, szükséges valamiféle – számítógép szempontjából értelmezhető – leírás vagy reprezentáció. Ez a gyakorlatban azt jelenti, hogy vektorok segítségével írjuk le a szekvenciákat. Ezt követően tudunk alkalmazni olyan algoritmusokat (logisztikus regresszió stb.), amelyek segítségével aztán például előre tudjuk jelezni, hogy egy adott mikroorganizmus mennyire lehet veszélyes. A genomikai nyelvmodell pontosan az a „fekete doboz", aminek beadunk egy szekvenciát, és kidob egy vektorreprezentációt.

A Komondor lehetővé tette a ProkBERT nyelvmodellcsalád kidolgozását és vizsgálatát[1], így létre tudtunk hozni olyan kompakt, de hatékony modelleket (ábra), amelyek a széles kutatói közösség számára is könnyen hozzáférhetőek, és bárki által alkalmazhatóak.



A ProkBERT modell. A modell elsősorban a mikroorganizmusokhoz köthető problémák megoldására jött létre, így nagy mennyiségű baktérium-, vírus-, archea- és gombaszekvencián lett előtanítva. Ehhez kapcsolódóan egy, a genomikai szekvenciát jól kezelő, k-mer-alapú tokenizálási eljárást is létrehoztunk, ami a lokális kontextust is figyelembe veszi (local context aware tokenization). A modell a nukleotidszekvenciákhoz vektorreprezentációt állít elő, ami széles körben és rugalmasan felhasználható, klaszterezési, osztályozási vagy regressziós feladatokban is.

A modellek felhasználhatóságát számos feladaton bizonyítottuk; ezek közül most a bakteriofág-detekciót emelem ki. A bakteriofágok a baktériumokat fertőző vírusok; egyik lehetséges alkalmazásuk a fágterápia. „Az ellenségem ellensége a barátom”-elvet alkalmazva olyan vírust keresünk, ami specifikusan el tud pusztítani egy szuperrezisztens kórokozót. Ehhez szükséges a mikrobiomokban élő fágok azonosítása és karakterizálása. Egyrészről azonban viszonylag keveset tudunk ezekről a vírusokról, nagy részüket nem is ismerjük, így a hagyományos módszerek, amelyek adatbázis-összehasonlításon alapulnak, csak korlátozottan alkalmazhatóak; másrészről ezek a bonyolult, soklépcsős eljárások a gyakorlatban lassúak, és a már emlegetett nagy adatmennyiségre nehezen adaptálhatóak.

A ProkBERT modellek azonban nemcsak pontosabban és ügyesebben oldják meg pl. a fágazonosítás feladatát, hanem sokkal gyorsabban is – még más, jóval nagyobb neurálisháló-alapú megoldásokhoz képest is, mint amilyen a Nucleotide Transformer (az InstaDeep, az Nvidia és a TUM modellje) vagy a DNABERT-2.[2,3] Ráadásul olyan típusú fágokra is meglepően jól működik a ProkBERT, amelyeket a modell a tanítás folyamán nem látott: pl. mélytengeri vagy egyéb extrém környezetben található vírusokra.

1. Ligeti, Balázs, et al. “ProkBERT family: genomic language models for microbiome applications.” Frontiers in Microbiology 14 (2024): 1331233.
2. Zhou, Zhihan, et al. “Dnabert-2: Efficient foundation model and benchmark for multi-species genome.” arXiv preprint arXiv:2306.15006 (2023).
3. Dalla-Torre, Hugo, et al. “The nucleotide transformer: Building and evaluating robust foundation models for human genomics.” BioRxiv (2023): 2023-01.

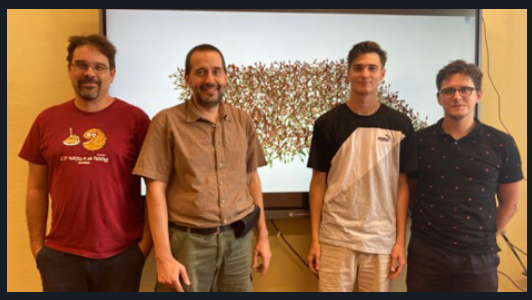
The Magnetic Exchange – MagEx projekt

A mágnesség, mely a természet egyik fundamentális kölcsönhatásának a megnyilvánulása, mind a mai napig aktív kutatások, technológiai innovációk mozgatóereje. A korai felfedezőket vezető iránytűtől a digitális emlékeinket tároló merevlemezekig a mágneses anyagok kulcsszerepet játszottak modern világunk alakításában. Az információtechnológia területén ezek az anyagok a háttérben működő, de nélkülözhetetlen hősök, lehetővé téve roppant mennyiségű adat tárolását.

Az utóbbi években megnőtt az érdeklődés a kétdimenziós (2D) van der Waals-anyagok iránt. Ezek a hihetetlenül vékony, gyakran csak néhány atom vastagságú anyagok egyedi tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek eltérnek tömbi megfelelőiktől. Potenciális alkalmazásaik az ultrahatékony elektronikától a rugalmas kijelzőkön át a fejlett érzékelőkig terjednek. Ezen kétdimenziós anyagok atomi pontosságú rétegezése – akár egy nano-építőjáték – megnyitja az utat olyan egyedi anyagok tervezése előtt, amelyek tulajdonságait igény szerint alakíthatjuk.

A mágnesség és a 2D anyagok metszéspontjában új határterület rejlik: újszerű mágneses 2D anyagok, mint a króm-jodid (CrI_3) és a vas-germánium-tellurid (Fe_3GeTe_2). Ezek az anyagok még atomi méretben is megtartják mágneses tulajdonságaikat, ami forradalmasíthatja a memóriaarchitektúrákat. Képzeljünk el egy olyan számítógépes memóriát, amely nemcsak hihetetlenül sűrű, de sokkal kevesebb energiát is fogyaszt. Ezek az anyagok utat nyithatnak a neuromorf számítástechnika felé, utánozva az emberi agy hatékonyságát, és egy új korszakot hozhatnak el a kvantum-számítástechnikában. Ezen nanoméretű csodák további kutatása révén egyre közelebb kerülünk egy olyan jövőhöz, ahol az információfeldolgozás gyorsabb, hatékonyabb és erőteljesebb, mint valaha.

A MagEx kutatói a kondenzált anyagok fizikájának – különösen a modern alacsony dimenziós anyagok elméleti tanulmányozásának – elismert kutatói. Ezen anyagok elektronszerkezetének vizsgálata kulcsfontosságú a kvantumfizika és az anyagtudomány szempontjából. Az alacsony dimenziós anyagok, mint például a 2D rendszerek, olyan egyedi tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek eltérnek háromdimenziós megfelelőiktől. A MagEx projekt keretében vizsgált rendszerek modellezése és elemzése úttörő kutatásnak bizonyult ezen a – csúcstechnológiák szempontjából kiemelkedő – területen.

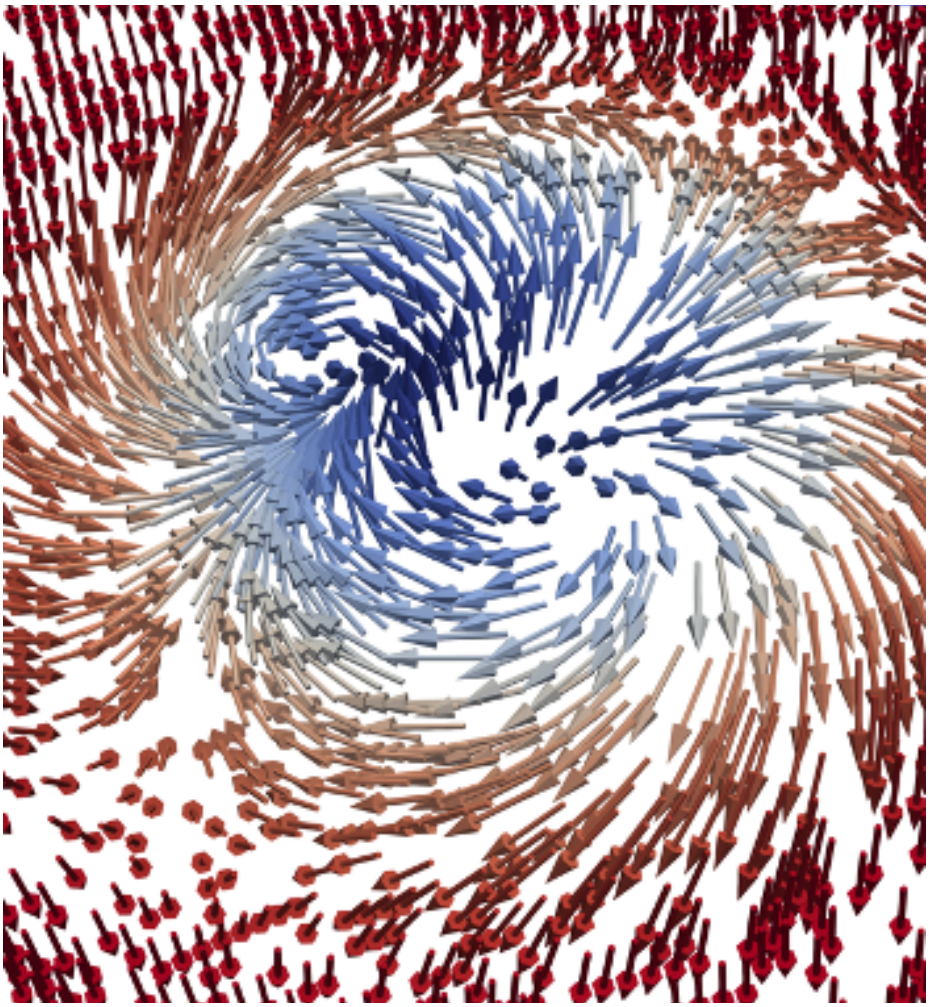


A MagEx kutatócsoport néhány ELTE-s tagja

A MagEx csoport munkájának fő célja a mágneses van der Waals-heterostruktúrák mélyreható tanulmányozása és az ezeken alapuló újszerű mágneses memóriaarchitektúrák (MRAM) kifejlesztése. A csoportban részt vevő kutatók:
Oroszlány László (adjunktus, ELTE),
Koltai János (adjunktus, ELTE),
Tajkov Zoltan (posztdoktor, ELTE),
Al-Assaf Assem (PhD-hallgató, ELTE),
Balogh András (PhD-hallgató, ELTE),
Pozsár Dániel Tibor (PhD-hallgató, ELTE),
Sipos Marcell Balázs (BSc-hallgató, ELTE),
Rozsa Levente (tudományos főmunkatárs, ELTE)

Nemzetközi partnereinkkel, különösen az oviedói egyetemmel együttműködve, a MagEx munkatársai nemrégiben egy olyan szofisztikált számítási keretrendszert fejlesztettek ki, amely lehetővé teszi a mágnesség tanulmányozását atomi vékony rétegekben. Ez a keretrendszer jelentős előrelépés, mivel lehetővé teszi a mágneses kölcsönhatások mikroszkopikus megértését atomi szinten. Ez a különböző szakértelmek összekapcsolását igénylő együttműködés kiemelt szerepet fog játszani az elméletileg és kísérletileg tanulmányozható rendszerek körének bővítésében, jelentősen hozzájárulva a közeljövő komplex tudományos kihívásainak leküzdéséhez.

Az alacsony dimenziós rendszerekben a mágneses fázisok sokkal összetettebbek lehetnek, mint a mindennapi életből ismert egyszerű ferromágnesek (például a hűtőmágnesek). Ezek a rendszerek a mágneses jelenségek széles skáláját mutathatják, beleértve az antiferromágnesességet, ahol a szomszédos elemi momentumok ellentétes irányban rendeződnek, és olyan egzotikusabb állapotokat, mint a skyrmionok – apró, örvénylő mágneses konfigurációk (ld. ábra), amelyek topológiailag védettek. E komplex mágneses fázisok megértése nemcsak elméleti kihívás, hanem kísérleti is, mivel ezeknek az új struktúráknak ígéretes alkalmazásai vannak a jövő technológiáiban, például a nagy sűrűségű adattárolásban és a kvantum-számítástechnikában.



Skyrmiont formáló mágneses momentumok

A kutatás elvégzéséhez a MagEx projekt a KIFÜ által biztosított Komondor-klasztert használja. Ez a hatékony számítási eszköz lehetővé teszi számunkra, hogy nagy léptékű ab initio számításokat és atomisztikus mágneses dinamikai szimulációkat végezzünk, amelyek elengedhetetlenek annak feltárásához, hogy a mikroszkopikus mágneses kölcsönhatások hogyan tükröződnek megfigyelhető tulajdonságokban, például kritikus hőmérsékletekben és mágneses textúrákban. A MagEx kutatását tovább erősíti a berlini Helmholtz Központ és a valenciai egyetem kísérleti szakértőivel való partneri viszony, biztosítva, hogy az elméleti vizsgálatok kísérleti valóságban gyökerezzenek. Ezek az erőfeszítések együttesen a MagExet és partnereit a kondenzált anyagok fizikájának élvonalába helyezik, és lehetőséget nyújtanak arra, hogy forradalmasítsák az alacsony dimenziós rendszerek mágnesességének megértését.

IMPRESSZUM

Felelős Kiadó:
Kormányzati Informatikai Fejlesztési Ügynökség elnöke
Szakmai lektor: Feró Orsolya, Ujlaki Gyula
Korrektor: Földeáki Andrea
Grafikai tervezés: Matisz Teodóra
Cím: Kormányzati Informatikai Fejlesztési Ügynökség
1134 Budapest, Váci út 35.
www.kifu.gov.hu
E-mail: info@kifu.gov.hu


HPC @hu
Kompetencia Központ
KIFÜ
Az Európai Unió
társfinanszírozásával
EURO²
Az EuroCC 2 projektet az Európai Unió Horizon 2020 kutatási és innovációs keretprogramja a 101101903. számú támogatási szerződésben foglaltaknak megfelelően támogatja.
hpc.kifu.hu
hpc@kifu.gov.hu