

## ÚSPĚŠNÉ PŘÍBĚHY | VYCHYTÁVKY VĚDY A VÝZKUMU



### Na superpočítač ANSELM se stojí fronta

Proč jsou superpočítače super a jaké vlastnosti by měli mít vědci, kteří s nimi chtějí pracovat, prozradil Mgr. Branislav Jansík, Ph.D., ředitel sekce superpočítačových služeb Národního superpočítačového centra IT4Innovations.

S výpočetními modely, které využívají superpočítače, začal Branislav Jansík pracovat před jedenácti lety ve svém původním oboru, jímž byla chemie. Do Národního superpočítačového centra IT4Innovations přišel v roce 2012 z Institutu chemie dánské Aarhus University, kde se významně podílel na vybudování tamního počítačového clusteru. Při své práci využívá výpočty českého superpočítače ANSELM, který se nachází v areálu Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava.



#### Jak jste se k oblasti superpočítačů dostal a jak souvisí s vaším původním oborem, kterým je chemie?

K superpočítači jsem se poprvé dostal jako student fyzikální a teoretické chemie na Univerzitě Komenského v Bratislavě. Katedra fyzikální chemie v té době provozovala nezanedbatelné počítačové centrum. Pak v průběhu postgraduálního studia na Královské technické univerzitě ve Stockholmu jsem začal denně využívat superpočítače švédských výpočetních center. Superpočítače souvisí s teoretickou chemií velmi úzce. Výpočetní modely používané v teoretické chemii jsou totiž nesmírně výpočetně náročné. Jenom superpočítače umožnily praktické využití těchto modelů pro výpočty nad skutečnými molekulami. Je tady také přímá vazba na superpočítače, jelikož modely v teoretické chemii jsou formulovány a vyvíjeny s ohledem na architekturu a schopnosti superpočítačů. Na druhou stranu, vývojáři a jejich modely ovlivňují návrh a stavbu superpočítačů. Superpočítač, stejně jako mikroskop, je jedním z nepostradatelných nástrojů výzkumu v chemii.



**Co je podle vašeho názoru na superpočítači nejvíce „super“?**

Na superpočítači je skvělé, že prostřednictvím modelů je možné vidět dovnitř velmi komplexních jevů, a pochopit tak skryté, vnitřní hnací síly, které ve svém výsledku vedou k manifestaci jevu. Další skvělá věc je rozmanitost způsobů, kterými je na superpočítači možné provést výpočty, šíře škály možností formulace a implementace výpočetních modelů. To dává prostor na objevování, bádání i hraní a mnohdy přináší přelomové nápady, postupy a výsledky.

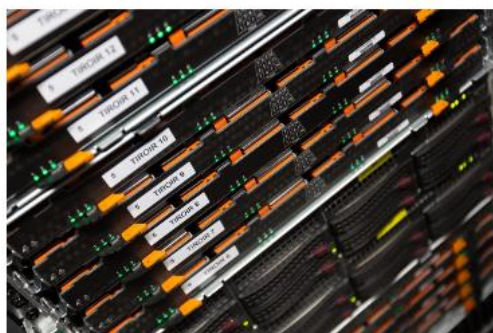


**Jste ředitelem superpočítačových služeb. Řekněte nám, existuje pro laika srozumitelné srovnání běžného stolního počítače a superpočítače? Ve kterých parametrech jsou rozdíly nejvýraznější?**

V porovnání se stolním počítačem jsou nejvíce rozšířené dva typy superpočítačů. Takzvaný SMP superpočítač se z pohledu uživatele chová jako nafouklý stolní počítač: obrovská kapacita a rychlost disku, terabajty paměti, desítky až stovky velmi rychlých procesorů. Mnohem rozšířenější a výkonnější je však takzvaný cluster. Ten se z pohledu uživatele chová jako velké množství (stovky až desetitisíce) velmi výkonných stolních počítačů. Počítač ANSELM je tohoto typu. Pokud tedy pro své výpočty dokážete vytěžit 1000 stolních počítačů, superpočítač pro vás bude ideální.

**K jakým nejzajímavějším výsledkům jste zatím došli v rámci vašeho působení v Národním superpočítačovém centru IT4Innovations?**

Jedním ze zajímavých výsledků je přitáhnutí pozornosti české vědecké komunity v oblasti počítačového modelování a její bohatá účast v soutěži o získání výpočetních prostředků. Na superpočítači ANSELM intenzivně počítají sedm měsíců po spuštění vědecké týmy z celé České republiky.



**Jak je superpočítač v současné době vytížený a jaké zajímavé plány s ním máte do budoucna?**

Vytíženost superpočítače ANSELM si můžete zobrazit na adrese <http://www.it4i.cz/vytizeni-superpocitace-anselm/>. V posledních týdnech je vytížení kolem 90 %, dlouhodobě je to přes 70 %. To však neznamená, že by počítač neměl co počítat, naopak, fronta výpočetních úloh je týden dlouhá. Úlohy se však musí do počítače naskládat jako tetrisové kostky do studny, proto není možné dosáhnout ideálního vytížení. Plánujeme aktivní spolupráci s dalšími skupinami uživatelů zejména v oblasti zpracování obrazu a genomických dat. Čeká nás také stěhování do nové budovy datového centra.

**Máte zahraniční zkušenosti. Jaký je podle vašeho názoru český superpočítač ANSELM ve srovnání se zahraničními superpočítači?**

Superpočítač ANSELM je na světový standard poměrně malý. Mým cílem je však vytvářet uživatelské prostředí srovnatelné se zahraničními superpočítači a nabízet uživatelům stejnou, nebo lepší úroveň služeb a komfortu.

**Trávíte i svůj volný čas u počítače, byť toho obvyčejného, nebo se naopak snažíte si od veškeré techniky trochu odpočinout?**

I volný čas někdy trávím při počítači, zejména když není čas na jiné, náročnější aktivity. Většinou nějakým programováním pro vlastní potěšení.

**Mohl byste se s námi podělit o doporučení mladým lidem, kteří do budoucna zvažují kariéru ve vašem oboru? Jaké vlastnosti a schopnosti v něm považujete za nejdůležitější?**

Za nejdůležitější považuji schopnost a chuť zkoumat, učit se a objevovat nové věci. Superpočítače jsou užitečné zejména ve spojení s konkrétní vědní doménou, takže doporučuji profilaci v některém z mnoha oborů, které superpočítače využívají. V každém případě základy numerické matematiky, lineární algebry a programování jsou vstupní branou do světa superpočítačů.

-

**Základní informace o Národním superpočítačovém centru IT4Innovations:**

Národní superpočítačové centrum IT4Innovations se zaměřuje na vědecký výzkum v oblasti informačních technologií, a to právě s důrazem na výzkum a vývoj v oblasti superpočítání. Zřizovatelem je Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, v jejímž areálu se superpočítačové centrum rovněž nachází. Na projektu od počátku spolupracují také další tři univerzity – Ostravská univerzita, Slezská univerzita a VUT Brno. Spolu s nimi se na jedinečném centru superpočítání podílí také Akademie věd, přesněji její Ústav geoniky. Národní superpočítačové centrum IT4Innovations je od svého počátku součástí mezinárodní sítě superpočítačových expertních pracovišť PRACE a členové jeho týmu jsou mezinárodně uznávanými odborníky. Více informací naleznete na <http://www.it4i.cz/>.