

**Při příležitosti nedávného významného rozšíření jednoho z nejlépe vybavených pracovišť na akademické půdě v České republice nám poskytl rozhovor děkan doc. RNDr. Luděk Matyska, CSc.**

## Akademická supersíla

**Chip:** *Jak se Masarykova univerzita dostala k realizaci superpočítačového centra?*

**Doc. L. Matyska (L. M.):** To, co je u nás, a nejen na Masarykově univerzitě, vzniklo z iniciativy Ministerstva školství ČR a Fondu rozvoje vysokých škol v roce 1994. Tehdy se ve Fondu rozvoje sešlo asi 15 žádostí z celé republiky o dotace na výpočetní servery střední a nižší třídy. Realizaci pilotního projektu byla pověřena rada, do jejíhož čela jsem byl ustaven. Tehdy se po netriviálním výběrovém řízení rozhodlo o pořízení velkých systémů na tři místa v republice – Karlovu univerzitu, Masarykovu univerzitu a VUT Brno.

**Chip:** *Snažili jste se o vzájemnou koordinaci?*

**L. M.:** Ano, ale koordinace byla velmi volná. V roce 1996 jsme v rámci jiného programu ministerstva získali projekt pod názvem Metacentrum. Jde o projekt pro podporu rozsáhlých distribuovaných výpočtů (skončil vloni), jehož cílem bylo propojit jednotlivá centra do jednoho virtuálního celku. Tak měl být vytvořen rozsáhlý distribuovaný superpočítač, v němž se dají spouštět úlohy přes jednotlivé uzly. Cílem bylo i uspořít prostředky – licenci nějakého programu zakoupenou zde v Brně mohl používat i kdokoliv z Prahy.

**Chip:** *Kdo má přístup k těmto výpočetním kapacitám?*

**L. M.:** Počítače byly od začátku otevřeny celé akademické komunitě. Kdokoliv z vysokých škol včetně studentů může požádat o účet. Platí to pro všech pět center a pro všechny vysoké školy z České republiky. Rozlišujeme jen mezi lidmi, kteří si to chtějí pouze zkoušet, a seriózními projekty.

**Chip:** *Přejdeme k vybavení na Masarykově univerzitě. Proč jste zvolili právě SGI?*

**L. M.:** Protože stroje firmy SGI jsou prakticky ideální pro oblast přírodních věd. Veškerý software v této oblasti je primárně vyvíjen právě pro počítače SGI. Vždy jsou první nebo jednou z prvních platforem, pro které nové programy existují. Před lety byl zakoupen server Power Challenge – původně osmiprocessorový, pak byl rozšířen na 12 procesorů MIPS R10000. Loni jsme – Plzeň, Praha a my – získali prostředky na výrazné povýšení. My jsme koupili 32procesorový počítač Origin2000 s 16 GB paměti a 150 GB na discích v racku a dalších 250 GB v diskovém poli.

Na konci roku byl pořízen ještě osmiprocessorový Onyx2 se dvěma grafickými subsystémy Infinite Reality.

**Chip:** *Třicet dva a osm procesorů, to už je velký výpočetní výkon.*

**L. M.:** Ano, a ještě máme v plánu spojit Origin s Onyxem a získat čtyřicetiprocessorový systém. Nevím, jak se to potom bude nazývat, ale chtěli bychom mít zabudovány zmíněné dvě grafiky ve velkém systému. Zkusíme vytvořit vyšší celek čtyřicetiprocessorového počítače, což bude naprosto bezkonkurenčně nejvýkonnější počítač v České republice v akademické sféře. Na tomto systému bude běžet jediná instalace operačního systému. To je velká výhoda proti masivně paralelním počítačům, kde musí být na každém uzlu jeden operační systém a další zdroje, například operační paměť. Tento rys se pak projeví ve financích, protože nás to přijde podstatně levněji. Když potřebujeme povýšit operační systém, tak nakupujeme a hlavně platíme jednu jedinou licenci, kdežto jinde se platí tolik licencí, kolik je procesorů.

**Chip:** *Takže například pro 128 procesorů by se muselo platit 128 licencí?*

**L. M.:** Ano. A to je také důvod, proč je pro nás výhodná architektura cc-NUMA serveru Origin2000 i vizualizačního superpočítače Onyx2.

**Chip:** *Jaké aplikace vyvíjíte nebo provozujete?*

**L. M.:** Co se týká aplikací, specializujeme se na přírodní vědy. Nejzajímavější je molekulové modelování a studie dynamiky a flexibility biologicky zajímavých molekul z Přírodovědecké fakulty. Výsledkem z jediné laboratoře jsou pak desítky publikací ročně. Spolu s námi vyvíjejí software, který se my snažíme paralelizovat do rozsáhlého výpočetního prostředí. Software je určen pro konformační analýzu biologicky zajímavých molekul – zejména peptidů a nukleových kyselin. Právě Onyx2 byl koupen k řešení náročných vizualizačních problémů.

Na naší fakultě existuje Laboratoř interakce člověka s počítačem (úmyslně neříkám virtuální reality), kde pracujeme –kromě výzkumu algoritmů pro vizualizace – na silové zpětné vazbě. Laboratoř byla založena v rámci stejnojmenného komplexního projektu Grantové agentury ČR pod vedením doc. Jiřího Sochora z naší fakulty. Já se na projektu podílím jako spoluřešitel, zabývající se studovaným modelem a zejména otázkami paralelizace řešených úloh.

V současné době vyvíjíme systém, který by dovedl fyzikálně “osahat” molekuly. Jednoduše řečeno si můžete pomocí silové zpětné vazby sáhnout na molekulu. Zároveň s tím se díváte a zjišťujete, jak je co kde pružné, pevné a odolné. Tím se získává představa a vjem nejen vizuální. Máme dva systémy pro zpětnou vazbu a chtěli bychom dosáhnout ještě torze – krouživého pohybu s molekulou – aby bylo možné vyzkoušet, jak je těžké s danou molekulou nebo systémem otočit. Náš systém je momentálně uzpůsoben pro dotek, takže zjistíte, že toto je měkké, tamto tvrdé. Naši představou je spojení této silové vazby on-line s vizualizačním výpočtem, který bude korigovat to, co bude experimentátor zkoušet rukou. V praxi se to projeví tak, že se vnoříte do molekulárního prostředí, budete držet jednotlivé části molekuly, dotýkat se jí a výpočetní systém vám bude vytvářet realistický fyzikální model. Musíme se naučit synchronizovat vizualizaci se zpětnou vazbou a s celým ovládáním. Proto je u nás instalován Onyx a já předpokládám, že v budoucnu zřejmě ani nebudeme potřebovat výkon všech 40 procesorů.

**Chip:** *To předpokládá vyspělé vybavení. Jak komunikujete s modelem vytvářeným v počítači?*

**L. M.:** Jako vybavení máme datové rukavice s přenosem pohybu, helmy a dva přístroje Phantom s magnety a servomotorky pro zpětnou vazbu. Zajímavé na celém systému interakce je to, že zatímco pro vizuální vjemy stačí 24 obrázků za sekundu, při silové zpětné vazbě musíme mít 2000 zpětných impulzů za sekundu, aby nevznikal trhavý a oscilační dojem. Menší frekvenci náš hmat bezpečně

pozná a projevuje se to zpětnými rázy. Zřejmě je to zejména při průniku do měkkého prostředí, kdy odpor postupně narůstá.

**Chip:** *Mohli bychom pro čtenáře vaše cíle jednoduše shrnout?*

**L. M.:** Pokusím se: smyslem výzkumu je nejen vidět, ale i cítit, zda je jedna molekula přitahována nebo odpuzována druhou, aby tomu mohl člověk pomoci a přímo to cítit. Je to jako když zkoušíte vsunout klíč do zámku. Pokud to necháte počítat čistě fyzikálně, tak správnou polohu nakonec najdete, ale projde se celá řada stavů, které s hmatovou vybaveností minete, protože zjistíte, že tady nebo jinde to klade odpor. Budeme mít možnost pomoci molekulám v interakci a v praxi tvořit pak mikroorganismy s vlastností odbourávání škodlivých látek. Tato problematika se dotýká i odbourávání ropných produktů. To by byl velký přínos pro životní prostředí. Na Masarykově univerzitě se tímto projektem zabývá Laboratoř struktury a dynamiky biomolekul, kterou vede profesor Jaroslav Koča.

**Chip:** *Kdy můžeme očekávat první výsledky?*

**L. M.:** Při řešení spolupracujeme s lidmi v USA, kteří mají na tyto věci patenty, a naším plánem je do třetího čtvrtletí letošního roku postavit prototyp systému podporujícího torzní interakce.

**Chip:** *Děkuji vám za rozhovor a přeji hodně úspěchů.*

*Za Chip rozmlouval Lubor Mára*