

## KOMPLEX BIOKÉMIAI RENDSZEREK SZUPERSZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

**Kutatóink, Legeza Örs és Menczer Andor közreműködésével fejlesztett új szimulációs modell bonyolult biokémiai összefüggéseket is segít megoldani.**

Új számítási rekordot állított fel bonyolult kvantumfizikai rendszerek szuperszámítógépes szimulációi terén két magyar kutató, az ELTE doktorandusza, Menczer Andor és a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos tanácsadója, Legeza Örs. Az AI-gyorsítókkal elért eredményük új mérföldkövet jelent a kvantum anyag számítógépes modellezése terén, és nagy segítséget nyújthat olyan kísérletek és ipari fejlesztések elkészítésénél, amelyek korábban rengeteg időbe és pénzbe kerültek.



*fotó: Adobe Stock*

Kétszázötvenezer milliárdnyi elemi műveletet képes megoldani másodpercenként az a szimulációs program, amelynek segítségével csökkenteni lehet például a gyógyszerfejlesztés, vagy épp az energiaszállítás hatékonyságának növelésére irányuló kutatások költségeit. A tenzorhálózat algoritmus alkalmazásával az ELTE

doktorandusz hallgatója, Menczer Andor és a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont (FK) tudományos tanácsadója, Legeza Örs csaknem negyed PetaFlops teljesítményt ért el egyetlen számítógépen. Az erről szóló eredményt a közelmúltban publikálták [legújabb tudományos cikkükben](#) az amerikai Pacific Northwest Nemzeti Laboratóriummal, illetve az NVIDIA és SandboxAQ Google startup ipari partnerekkel közösen. „Ez az AI-gyorsítókkal elért eredmény új mérföldkövet jelent a kvantum anyag számítógépes modellezése terén, és a klasszikus és kvantumszámítógépek teljesítményharcában egy újabb megdöntendő határt támaszt” – értékelte az eredményüket Legeza Örs.

Az NVIDIA DGX-H100 eszközön elért 246 TeraFlops teljesítmény egy csaknem 80 darab 128 magos számítógép, avagy 700-1000 darab modern laptop teljesítményével egyenértékű. Ez majdnem a fele a Komondor nevű szuperszámítógép mesterséges intelligencia (AI) partíció teljesítményének (0,6 PetaFlops), ha egy hazai példán keresztül szeretnénk szemléltetni a gép teljesítményét. Mindez igen komoly áttörést jelent az új hardver eszközök által biztosított teljesítmény kiaknázásra a nem kifejezetten mesterséges intelligenciára épülő algoritmusok esetén. *(A kimagasló eredményről és az együttműködésről az amerikai Energia Hivatal (DOE), a Pacific Northwest Nemzeti Laboratórium, az NVIDIA és SandboxAQ közös sajtónyilatkozatot adott ki, amely [itt tekinthető meg.](#))*

Az elérhető teljesítmény még tovább növelhető az egyedi számítógépek összekapcsolásával. Így az úgynevezett multinode-os variánssal a több PetaFlops-os tartomány elérése sem jelent akadályt. Nem mellesleg 2015-ben a világ akkori egyik legnagyobb japán szuperszámítógép teljesítménye 10 PetaFlops volt. „Az egyre újabb matematikai algoritmusok és az információtechnológia szinte felfoghatatlan ütemű fejlődése együttesen olyan bonyolult kvantum rendszerek vizsgálata előtt nyitja meg az utat, melyek korábban csak a kutatók álmaiban léteztek” – véli a HUN-REN Wigner FK tudományos tanácsadója.

Legeza Örs szerint a számítási bravúr mellett a közös kutatás példátlan pontosságú eredményeket hozott az átmenetifém-metalloenzimeket tartalmazó összetett biokémia rendszerekre is. A fémtartalmú katalizátorok számos ipari és biológiai folyamatban kulcsfontosságúak és alapvető szerepet játszanak a kémiai reakciók elősegítésében. Az energiaátalakítás ezen „kiserőművei” továbbá létfontosságúak több iparág számára is, beleértve az orvostudományt, az energiatermelést és számos fogyasztói terméket. A katalizátorok felgyorsítják a kémiai reakciókat, csökkentve a kémiai átalakuláshoz szükséges energiát, hatékonyabbá és fenntarthatóbbá téve ezáltal a kapcsolódó folyamatokat. „Megértésük és optimalizálásuk elengedhetetlen napjaink nagy globális kihívásainak kezeléséhez, mint például a zöldenergia-termelés vagy a környezeti fenntarthatóság” – teszi hozzá a HUN-REN kutatója.

Az új kutatási irány egyre nagyobb figyelmet kap ipari körökben is mivel a tenzorhálózat algoritmus AI-alapú módszerekkel való ötvözése egy egészen új szimulációs környezetet

teremt a gyógyszeripar és vegyipar számára is. Az óriási teljesítménynövekedés révén pedig a korábban több hónapig tartó számítások jelenleg már akár napi szinten is megvalósíthatók, ami a kvantumkémiai modellezéshez biztosít egy egészen új eszköztárat.

Jelenleg együttműködésben az NVIDIA és az AMD információtechnológiai mérnökeivel olyan újabb fejlesztésű hardvereken folyik az algoritmus optimalizálása, amelyek egy része csak a jövőben válik elérhetővé a nyilvánosság számára. „A közös kutatási eredmény egyben rávilágít az akadémia és ipari szektor szinergiájában rejlő óriási lehetőségekre” – tette hozzá Legeza Örs, a HUN-REN Wigner tudományos tanácsadója.