

Kémiai grid kialakítása és alkalmazása a légszennyezés rövid és hosszú távú előrejelzésében

Magyar nyelvű összefoglaló

Újabban jelentősen terjednek az ún. Grid rendszerek, ahol nagyszámú, vagy nagyteljesítményű erőforrásokat kapcsolnak össze komplex feladatok megoldása érdekében. A jelen projekt célkitűzése, hogy a Grid rendszerek három fontos aspektusát kutassa, ill. azokhoz kapcsolódó konkrét eredményeket érjen el. Ezek az aspektusok a következők.

(a) Kémikus Grid létrehozása: a Grid, mint egy tudományterület támogatására létrejött elosztott rendszer megvalósítása. A projekt egyik célja, hogy a résztvevő kémikus partnerek számára hozzáférhetővé tegye mind a hazai grid számítási erőforrásokat (Magyar Klaszter Grid), mind az EU D23-as COST alprogramhoz tartozó SYMBEX projekt által megvalósítandó európai szintű kémiai grid infrastruktúrát.

(b) Grid, mint elosztott szuperszámítási rendszer. Az MTA SZTAKI létrehozott egy világszerte egyedülállóan integrált párhuzamos programfejlesztő rendszert, a P-GRADE-et, amely magas szintű párhuzamosítási koncepciójával, grafikus felületével és speciális párhuzamos debuggolási és teljesítményanalizálási eszközeivel rendkívül kényelmes környezetet biztosít szekvenciális programok párhuzamosításához. A projekt keretében a P-GRADE rendszert továbbfejlesztjük annak érdekében, hogy hatékony módon lehessen nagyszámításigényű párhuzamos programokat grid környezetben végrehajtani – azaz meg akarjuk oldani az alkalmazások automatikus vándorlását a grid számítási erőforrások között az aktuális terheltségi és elérhetőségi viszonyoknak megfelelően. A kémikus partnerek a P-GRADE rendszert fogják alkalmazni mind a javasolt, mind a kapcsolódó SYMBEX projekt keretében nagyszámításigényű alkalmazási párhuzamosításához és grid-en történő futtatásához.

(c) Grid, mint a komplex, kollaboratív munkát támogató elosztott informatikai rendszer megvalósítása és alkalmazása levegőszennyezés előrejelzésére (szmogriadó szakmai előkészítése). A projekt tagjai létrehoznak egy kollaboratív alkalmazást, amely szuperszámítógépén futtatva a levegőszennyezés operatív előrejelzését fogja biztosítani Magyarország területén. Ez a program ugyanakkor Grid alkalmazásként felhasználható lesz korábbi légszennyezési események szimulációjára és segítségével vizsgálható szmogriadó tervek és egyéb szennyezéskorlátozó intézkedések hatásossága. Ezzel demonstrálják a Grid alkalmazhatóságát és ennek segítségével utat nyitnak további komplex Grid alkalmazások készítéséhez.