

Odstartuje nová éra ve vývoji materiálových věd s pomocí superpočítačů

13.4.2023 - | Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava

Materiálové vědy jsou základem většiny technologií, které charakterizují naši současnou společnost a které budou utvářet i naši budoucnost. Objevování materiálů a možnost navrhovat a syntetizovat nové materiály se specifickými vlastnostmi jsou klíčové pro technologický pokrok a pro překonání nejkritičtějších výzev, kterým v současnosti čelíme - v oblasti udržitelnosti, ochrany životního prostředí, energetické bezpečnosti, zdraví atd. V době, kdy superpočítače nabízejí nebývalý výpočetní a zpracovatelský výkon, sdružuje projekt MaX 16 renomovaných evropských výzkumných center, superpočítačových center, univerzit a soukromých společností působících v této oblasti s cílem vyvinout nástroje potřebné k využití takto výkonného hardwaru.

Evropská centra excellence jsou na rozdíl od projektů dlouhodobějšího rázu a svým záběrem pokrývají potřeby některé z komunit (kosmologie, energetika, materiálové vědy apod.). MaX vstupuje do své třetí fáze, ve které se zaměří na simulace, studium a návrh nových materiálů pro nejrůznější aplikace. Mezi novými členy projektu je také národní superpočítačové centrum IT4Innovations, které je součástí VŠB - Technické univerzity Ostrava. Centrum excellence MaX je financováno Evropskou unií a podpořeno společným celoevropským podnikem EuroHPC a jeho členskými státy.

Přesné teoretické modelování a spolehlivé počítačové simulace jsou v materiálové vědě nesmírně důležité, protože umožňují výzkumným pracovníkům studovat základní jevy hmoty a následně tyto znalosti využít k návrhu nových materiálů s optimálními vlastnostmi pro konkrétní aplikace. „Projekt MaX využívá kvantově mechanický popis hmoty k vývoji simulačních softwarů, které se pro tyto účely ukazují jako mimořádně výkonné nástroje. Zaměřuje se nejen na jejich další vývoj, ale zejména na jejich optimalizaci, aby je bylo možné provozovat na nových exascalových superpočítačích,“ objasňuje Lubomír Říha z Laboratoře pro výzkum infrastruktury, který je hlavním řešitelem projektu v IT4Innovations.

„Náš tým vede pracovní skupinu zaměřenou na co-design, testování nových výpočetních technologií a vyhodnocení a zlepšení energetické efektivity simulačních softwarů. Dále budeme mít v projektu MaX na starost tvorbu workflows a vývoj nástrojů pro jejich spouštění na exascale počítačích, a kromě toho jsme součástí pracovní skupiny, která optimalizuje výkon a škálovatelnost softwarů pro materiálové vědy,“ uvádí Lubomír Říha. V IT4Innovations patří materiálové vědy mezi nejčastěji zkoumané obory - v minulých letech získaly nejvíce výpočetního času právě projekty z oblasti materiálových věd.

První setkání partnerů projektu proběhlo ve dnech 21. a 22. února v italské Modeně. Vzhledem k tomu, že se jedná o Evropské centrum excellence, v příštích čtyřech letech se bude projekt MaX výrazně angažovat nejen ve zmíněném výzkumu, ale i v oblasti školení, osvěty a vzdělávacích aktivit. Více informací naleznete na webových stránkách www.max-centre.eu.

<https://www.it4i.cz/o-it4i/infoservis/tiskove-zpravy/odstartuje-nova-era-ve-vyvoji-materialovych-ved-s-pomoci-superpocitacu>