

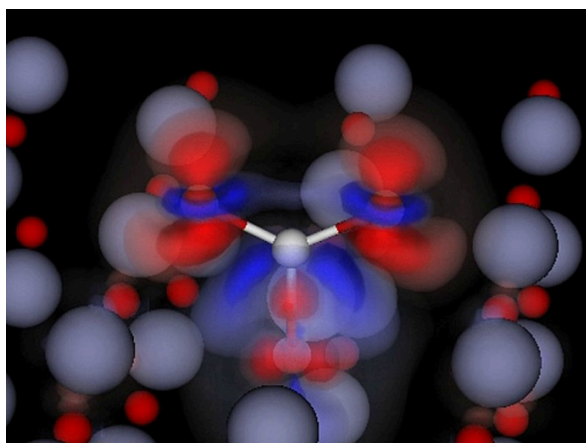
HORIZON
2020

The Novel Materials Discovery Laboratory

Wyniki w skrócie

Nowoczesna, współtworzona przez użytkowników platforma udostępnia i wykorzystuje obliczeniowe dane z zakresu badań materiałowych

Z rozwojem niemal każdego produktu komercyjnego związane są nowe materiały, ale bardzo wiele z nich pozostaje całkowicie niepoznane. W ramach pewnej unijnej inicjatywy opracowano zestaw narzędzi internetowych umożliwiających przechowywanie i korzystanie z tak dużych ilości danych.



© Matthias Scheffler

Praktycznie każdy nowy produkt komercyjny, czy to związany ze zdrowiem, technologią komunikacyjną czy czystą energią, wymaga zastosowania ulepszonych, nowych, a nawet nowatorskich materiałów. Ich odkrywanie jest jak dotąd jednym z najbardziej ekscytujących i ekonomicznie znaczących zastosowań obliczeń o wysokiej wydajności.

Big data ma rewolucyjny potencjał w wielu zastosowaniach, który daje nadzieję na przełomowe postępy w zakresie poprawy analizy i opisu zjawisk naukowych i właściwości materiałów. Aby w pełni wykorzystać istotne informacje i potencjał ogromnych ilości dostępnych danych, potrzebna jest odpowiednia infrastruktura do efektywnego gromadzenia, utrzymywania i wymiany informacji.

W ramach finansowanego przez UE projektu [NoMaD](#) opracowano narzędzia umożliwiające naukowcom z dziedziny nauk podstawowych i inżynierii rozwijanie badań materiałowych oraz identyfikowanie nowych zjawisk fizycznych, a przemysłowi pomagające w ulepszaniu istniejących produktów oraz opracowywaniu nowych produktów i technologii. „W ten sposób projekt NoMaD zmienił sposób myślenia naukowców w kierunku udostępniania wszechstronnych, dostępnych, interoperacyjnych i nadających się do wtórnego wykorzystania danych”, mówi koordynator projektu prof. Matthias Scheffler. „Otworzy to nowe możliwości w zakresie eksploracji i doskonalenia big data w badaniach materiałowych”.

Innowacyjne narzędzia ułatwiające odkrywanie, tworzenie i wykorzystywanie nowych materiałów

Utworzone i utrzymywane przez NoMaD [Repozytorium](#) jest obecnie największą na świecie bazą dla materiałoznawstwa obliczeniowego, zawierającą dane pochodzące od międzynarodowych badaczy oraz z innych baz danych. Zawiera pliki wejściowe i wyjściowe z kilku milionów obliczeń o wysokiej jakości. Ilość udostępnianych plików stale rośnie. W przeciwieństwie do innych repozytoriów, nie jest ono ograniczone do wybranych kodów komputerowych, ale służy całej społeczności dzięki wspieraniu wszystkich ważnych kodów obecnie stosowanych w badaniach materiałowych. Dzięki przechowywaniu nieprzetworzonych danych i bezpłatnemu przechowywaniu danych naukowych przez co najmniej 10 lat, repozytorium pomaga naukowcom w przechowywaniu i organizowaniu ich danych oraz w efektywnym dzieleniu się nimi z innymi badaczami.

Partnerzy projektu stworzyli [Archiwum](#), w którym przechowywane będą otwarte dane z repozytorium, przekształcone we wspólny format niezależny od kodu. Opracowano szereg parserów, które odczytują i tłumaczą wszystkie informacje zawarte w plikach wejściowych i wyjściowych. Dzięki temu dane z różnych źródeł mogą być porównywane i obsługiwane przez różne narzędzia NoMaD.

Zespół opracował kilka narzędzi umożliwiających wykorzystanie obszernych danych z archiwum. [Encyklopedia](#) pozwala użytkownikom zobaczyć, porównać, zbadać i zrozumieć dane dotyczące materiałów. Pomaga też w przeszukiwaniu właściwości wielu różnych materiałów. Zestaw [Analytics Toolkit](#) zawiera zbiór przykładów i narzędzi służących do pokazania, w jaki sposób dane materiałowe mogą zostać przekształcone w wiedzę. Wreszcie, członkowie zespołu zaprojektowali narzędzia pozwalające na zdalną wizualizację wielowymiarowych danych NoMaD w oparciu o dedykowaną infrastrukturę. Udostępniono scentralizowaną usługę, która umożliwia użytkownikom interaktywne wykonywanie kompleksowych zadań wizualizacji danych na komputerach bez konieczności instalowania specjalistycznego sprzętu czy oprogramowania.

„Projekt NoMaD odegrał istotną rolę w tworzeniu trwałej i niezawodnej infrastruktury

umożliwiającej efektywne gromadzenie i wymianę danych”, podsumowuje prof. Scheffler. Optymalizacja poszukiwania ulepszonych lub nowych materiałów będzie miała zauważalny wpływ na projektowanie materiałów w kluczowych obszarach, takich jak zdrowie, środowisko, przemysł ciężki, czysta energia, mobilność i TIK.

Słowa kluczowe

[NoMaD](#)

[dane](#)

[badania materiałowe](#)

[nowe materiały](#)

[big data](#)

[repozytorium](#)

Znajdź inne artykuły w tej samej dziedzinie zastosowania



Zwiększenie udziału zrównoważonych produktów pochodzenia biologicznego w rynku

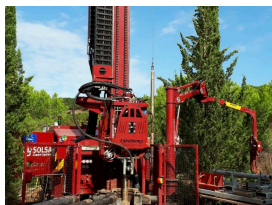
7 Maja 2021



Przełomowe oprogramowanie bezproblemowo przetwarza dokumentację produkcyjną

3 Stycznia 2020





Krok po kroku – ku bardziej zrównoważonemu sektorowi metalurgicznemu i górniczemu

18 Lutego 2020 



Otwarte stanowisko testowe innowacji dla lekkich elementów

17 Czerwca 2022 

Informacje na temat projektu

NoMaD

Identyfikator umowy o grant: 676580

[Strona internetowa projektu](#) 

DOI

[10.3030/676580](https://doi.org/10.3030/676580) 

Projekt został zamknięty

Data podpisania przez KE

28 Lipca 2015

Data rozpoczęcia

1 Listopada 2015

Data zakończenia

31 Października 2018

Finansowanie w ramach

EXCELLENT SCIENCE - Research Infrastructures

Koszt całkowity

€ 4 910 624,48

Wkład UE

€ 4 910 624,48

Koordynowany przez

MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT
ZUR FORDERUNG DER
WISSENSCHAFTEN EV



Germany

Ostatnia aktualizacja: 29 Marca 2019

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/259852-novel-userdriven-platform-shares-and-exploits-computational-materials-science-data/pl>

European Union, 2025

