



## El Centro de Excelencia NOMAD presenta la Enciclopedia NOMAD

El Centro de Excelencia (CoE en sus siglas en inglés) [NOMAD](#) ha presentado oficialmente una base de datos gratuita de las propiedades de materiales computacionales; la [Enciclopedia NOMAD](#). La interfaz intuitiva de la Enciclopedia permite acceder con más facilidad a la extensa colección de datos del proyecto, el [Repositorio NOMAD](#). Se trata de la mayor base de datos de materiales computacionales a nivel mundial, constituida por más de 3,4 millones de simulaciones con datos originados a partir de una gran variedad de métodos y programas.

El CoE NOMAD, del cual el [Barcelona Supercomputing Center \(BSC\)](#) es miembro, también convierte los datos a un formato uniforme y sin código, almacenado en [el Archivo NOMAD](#). La base de datos actúa como un repositorio de herramientas para una visualización avanzada y un análisis *big data*, mientras que la Enciclopedia proporciona un punto de acceso a los datos, orientado según el material.

[Este vídeo](#) muestra una visión general del CoE NOMAD.

### Una interfaz gráfica de usuario para todo el mundo

Gracias al conocimiento en diseño y experiencia de usuario del BSC, la interfaz de la Enciclopedia facilita la búsqueda y visualización de la masiva base de datos de materiales, tanto al público especializado como al no experto. Dicha intuitiva aplicación web permite a los usuarios buscar elementos químicos, una fórmula química o propiedades específicas.

Para cada material, se ofrece una caracterización general además de detalles específicos del material. De entre las características adicionales hay archivos descargables de realidad virtual de las estructuras atómicas que pueden ser de ayuda a los profesores a la hora de hacer clases de ciencia más atractivas o proporcionar un recurso para expertos que examinen materiales complejos para nuevas fuentes de energía eléctrica, por ejemplo.

Según **Georg Huhs**, investigador del departamento de *Computer Applications in Science & Engineering (CASE)* del BSC, “el éxito de NOMAD en recolectar y abrir una cantidad tan grande de datos sobre materiales es impresionante”. **Huhs**, que ha liderado la creación de la Enciclopedia NOMAD, explica que “para extraer el valor que tiene escondido, los datos se han hecho más visibles y explorables de una manera intuitiva. Eso es el que hace la Enciclopedia”.

Según **Huhs**, lo que se ha construido hasta la fecha es solo el principio: “con el tiempo, expandiremos las características de los materiales, añadiremos más tipos de materiales o más diferentes, e incluso proporcionaremos herramientas interactivas para facilitar las tareas de análisis complejos. Una de las ventajas del proyecto es que estas incorporaciones pueden ser desarrolladas en base a un interés concreto, en colaboración con un cliente industrial, por ejemplo, pero después mantenerse disponibles automáticamente para toda la base de datos y para todos los usuarios”.



### **La API – un diseño también para robots**

Todos los datos de la Enciclopedia son accesibles desde una [API](#) (*Application Programming Interface*) abierta y basada en la web. Eso significa que, por ejemplo, se puede descargar un conjunto de datos para plasmarlos en un entorno diferente o, incluso, utilizarlos como datos de inserción para realizar más simulaciones. Se pueden llegar a construir aplicaciones propias. La ciencia y la industria se pueden beneficiar de ello; por ejemplo, en la investigación de nuevos paneles fotovoltaicos o en el diseño de materiales para condiciones extremas.

Cada seis meses, el CoE organiza reuniones con su comité científico y su comité industrial para debatir las necesidades de los usuarios y los futuros pasos del proyecto. La última reunión científica [tuvo lugar](#) en el BSC entre el 3 y el 5 de octubre de 2016.

### **Sobre el CoE NOMAD**

El CoE NOMAD es un proyecto europeo que incluye el Barcelona Supercomputing Center, la Sociedad Max Planck, el King's College de Londres, la Universidad Humboldt de Berlín, la Universidad de Cambridge, la Universidad de Barcelona, la Universidad de Aalto, la Universidad Técnica de Dinamarca, el Leibniz-Rechenzentrum, el CSC – IT Center for Science y Pintail Ltd. El proyecto empezó en noviembre del 2015 y se prevé finalizar en octubre de 2018. Cuenta con financiación del programa de investigación e innovación de la Unión Europea Horizon 2020 (subvención nº. 676580), con un presupuesto de 4,9 millones de euros.

[www.nomad-coe.eu/](http://www.nomad-coe.eu/) | [www.twitter.com/NoMaDCoE](https://www.twitter.com/NoMaDCoE) | [www.facebook.com/nomadCoE](https://www.facebook.com/nomadCoE) | [www.linkedin.com/company/nomadlaboratory](https://www.linkedin.com/company/nomadlaboratory) | <https://www.researchgate.net/project/The-NOMAD-Laboratory-a-European-Centre-of-Excellence>

### **Sobre el Repositorio NOMAD**

Para saber más sobre el Repositorio de datos de ciencia de materiales computacionales: <https://youtu.be/L-nmRSH4NQM>

**Más información:** Anna Molinet [dissemination@bsc.es](mailto:dissemination@bsc.es)