



El Centre d'Excel·lència NOMAD presenta l'Enciclopèdia NOMAD

El Centre d'Excel·lència (CoE en les sigles en anglès) [NOMAD](#) ha presentat oficialment una base de dades gratuïta de les propietats computacionals dels materials: [l'Enciclopèdia NOMAD](#). La interfície intuïtiva de l'Enciclopèdia permet accedir amb més facilitat a l'extensa col·lecció de dades del projecte, el [Repositori NOMAD](#). Es tracta de la base de dades de materials computacionals més gran a nivell mundial, constituïda per més de 3,4 milions de simulacions, amb dades originades a partir d'una gran varietat de mètodes i programes.

El CoE NOMAD, del qual el [Barcelona Supercomputing Center \(BSC\)](#) és membre, també converteix les dades a un format uniforme i sense codi, emmagatzemat a [l'Arxiu NOMAD](#). La base de dades actua com un repositori d'eines per a una visualització avançada i una anàlisi *big data*, mentre que l'Enciclopèdia proporciona un punt d'accés a les dades, orientat segons el material.

[Aquest vídeo](#) mostra una visió general del CoE NOMAD.

Una interfície gràfica per a tothom

Gràcies a l'expertesa en disseny i experiència d'usuari del BSC, la interfície de l'Enciclopèdia facilita la cerca i visualització de la massiva base de dades de materials, tant al públic especialitzat com al no expert. Aquesta intuïtiva aplicació web permet als usuaris cercar elements químics, una fórmula química o propietats específiques.

Per a cada material, s'ofereix una caracterització general i detalls específics del material. Entre les característiques addicionals hi ha arxius descarregables de realitat virtual de les estructures atòmiques que poden ser d'ajuda a professors a l'hora de fer classes de ciència més atractives, o proporcionar un recurs per a experts que examinen materials complexos per a noves fonts d'energia elèctrica, per exemple.

Segons **Georg Huhs**, investigador del departament de *Computer Applications in Science & Engineering (CASE)* del BSC, "l'èxit de NOMAD en recollir i obrir una quantitat tan gran de dades sobre materials és impressionant". **Huhs**, que ha liderat la creació de l'Enciclopèdia NOMAD, explica que "per a extreure el valor que té amagat, les dades s'han fet més visibles i explorables d'una manera intuïtiva. Això és el que fa l'Enciclopèdia".

Segons **Huhs**, el que s'ha construït fins ara és només el començament: "amb el temps, expandirem les característiques dels materials, afegirem més tipus de materials o més diferents, i fins i tot proporcionarem eines interactives per a facilitar les tasques d'anàlisi complexes. Un dels avantatges del projecte és que aquestes addicions poden ser desenvolupades per un interès concret, en col·laboració amb un client industrial per exemple, i posteriorment romandre disponibles automàticament per a tota la base de dades i per a tots els usuaris".



L'API – un disseny també per a robots

Totes les dades de l'Enciclopèdia són accessibles des d'una [API](#) (*Application Programming Interface*) oberta i basada en la web. Això significa que, per exemple, es pot descarregar un conjunt de dades per a plasmar-les en un entorn diferent o, fins i tot, utilitzar-les com a dades d'inserció per a realitzar més simulacions. Es poden arribar a construir aplicacions pròpies. La ciència i la indústria se'n poden beneficiar; per exemple, en la recerca de nous panells fotovoltaics o en el disseny de materials per a condicions extremes.

Cada sis mesos, el CoE organitza reunions amb el comitè científic i l'industrial per a debatre les necessitats dels usuaris i les passes futures del projecte. L'última trobada científica [va tenir lloc](#) al BSC entre el 3 i el 5 d'octubre de 2016.

Sobre el CoE NOMAD

El CoE NOMAD és un projecte europeu que inclou el Barcelona Supercomputing Center, la Societat Max Planck, el King's College de Londres, la Universitat Humboldt de Berlín, la Universitat de Cambridge, la Universitat de Barcelona, la Universitat d'Aalto, La Universitat Tècnica de Dinamarca, el Leibniz-Rechenzentrum, el CSC – IT Center for Science i Pintail Ltd. El projecte va començar el novembre de 2015 i es preveu finalitzar l'octubre de 2018. Compta amb finançament del programa de recerca i innovació de la Unió Europea Horizon 2020 (subvenció núm. 676580), amb un pressupost de 4,9 milions d'euros.

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

Sobre el Repositori NOMAD

Per a saber més sobre el Repositori de dades de ciència de materials computacionals: <https://youtu.be/L-nmRSH4NQM>

Més informació: Anna Molinet dissemination@bsc.es