

Politechnika Łódzka jest jednym z partnerów Centrum Doskonałości TREX, finansowanego w ramach programu Horyzont 2020. Projekt potrwa 36 miesięcy. Jego całkowity budżet wynosi 5 mln euro.

W centrum doskonałości

Europejskie Centrum Doskonałości w dziedzinie obliczeń eksaskalowych TREX: *Osiągnięcie dokładności chemicznej w obliczeniach w eksaskali rozpoczęło działalność 1 października 2020 r.*

Międzynarodowe konsorcjum

Centrum Doskonałości TREX to konsorcjum 12 partnerów. W jego skład wchodzi poza Politechniką Łódzką uniwersytety i instytucje badawcze: University of Twente (Holandia), Centre National de la Recherche Scientifique (Francja), Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (Włochy), CINECA (Włochy), Jülich-Supercomputing Center (Niemcy), Max Planck Institute for Solid State Research w Stuttgarcie (Niemcy), University of Versailles Saint Quentin-en-Yvelines (Francja), Megware (Niemcy), Słowacki Uniwersytet Techniczny w Bratysławie, Uniwersytet Wiedeński (Austria) i TRUST-IT (Włochy).

Era eksaskali

W ostatnich latach Komisja Europejska poważnie zaangażowała się w wyzwanie, w którym biorą udział również Stany Zjednoczone i Chiny, polegające na zbudowaniu jednego z pierwszych komputerów zdolnych do osiągnięcia mocy obliczeniowej 1 eksaflopsa (tj. 1018 operacji na sekundę!).

Era eksaskali, w którą wkraczamy, oferuje niespotykane dotąd duże zasoby obliczeniowe dla społeczności naukowej i przemysłowej. Ta olbrzymia moc obliczeniowa pozwoli na przeprowadzanie sy-

mulacji przekraczających zasoby obliczeniowe współczesnych maszyn. Umożliwi prowadzenie wysoko wydajnych symulacji zespołowych (np. przesiewanie ogromnej liczby leków pod kątem szybkiego wyszukiwania tych najbardziej efektywnych).

Do pełnego wykorzystania obliczeń w eksaskali istniejące komputerowe kody obliczeniowe muszą zostać znacznie zmodyfikowane, m.in. by maksymalnie wykorzystać równoległe skalowanie.

Cel projektu TREX

Aktywność Centrum Doskonałości TREX obejmie obszar chemii kwantowej i obliczeniowej. Celem projektu jest rozwijanie i zastosowanie wysoko wydajnych programów obliczeniowych służących do symulacji kwantowo-mechanicznych w ramach stochastycznych metod kwantowych Monte Carlo. Algorytmy obliczeniowe kwantowej metody Monte Carlo są z natury rzeczy równoległe, mogą więc w pełni wykorzystać masową równoległość architektur eksaskalowych, które będą dostępne w niedługim czasie.

Połączenie zaawansowanych metod kwantowych z eksaskalą otworzy drogę do przeprowadzania symulacji z nieosiągalną obecnie dokładnością, umożliwiając przewidywanie właściwości cząsteczek i materiałów na poziomie kwantowym i prowadząc do projektowania nowych materiałów o żądanych właściwościach.

■ Katarzyna Pernal
Instytut Fizyki

