

Dan slovenskega superračunalniškega omrežja, MREŽA ZNANJA  
16. november 2023

arnes 

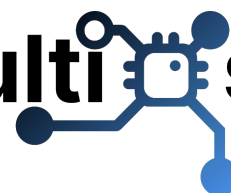


EURO

SLING

# MultiXscale

Tilen Potisk, Kemijski inštitut

Multi  scale

- **Cilji** projekta MultiXscale so izboljšanje
  - ~ **produktivnosti** znanstvenikov, ki razvijajo in uporabljajo prosto dostopne kode
  - ~ **zmogljivost** kod na EuroHPC opremi (in drugje)
  - ~ **prenosljivost** kod od laptopov do serverjev, oblakov (cloud) in HPC-jev
- Sestavljen je iz
  - ~ **znanstvenega dela** (CECAM), zadolžen za 3 pilotne primere uporabe
  - ~ **tehničnega dela** (EESSI), ki bo poskrbel da bodo znanstvene kode uporabne in optimizirane na katerikoli strojni opremi.
- Poudarek projekta MultiXscale je **večskalno modeliranje in izkoriščanje možnosti EuroHPC okolja.**
- Prehod na uporabo **eksaskalnih superračunalnikov za družbene namene.**

# MultiXscale



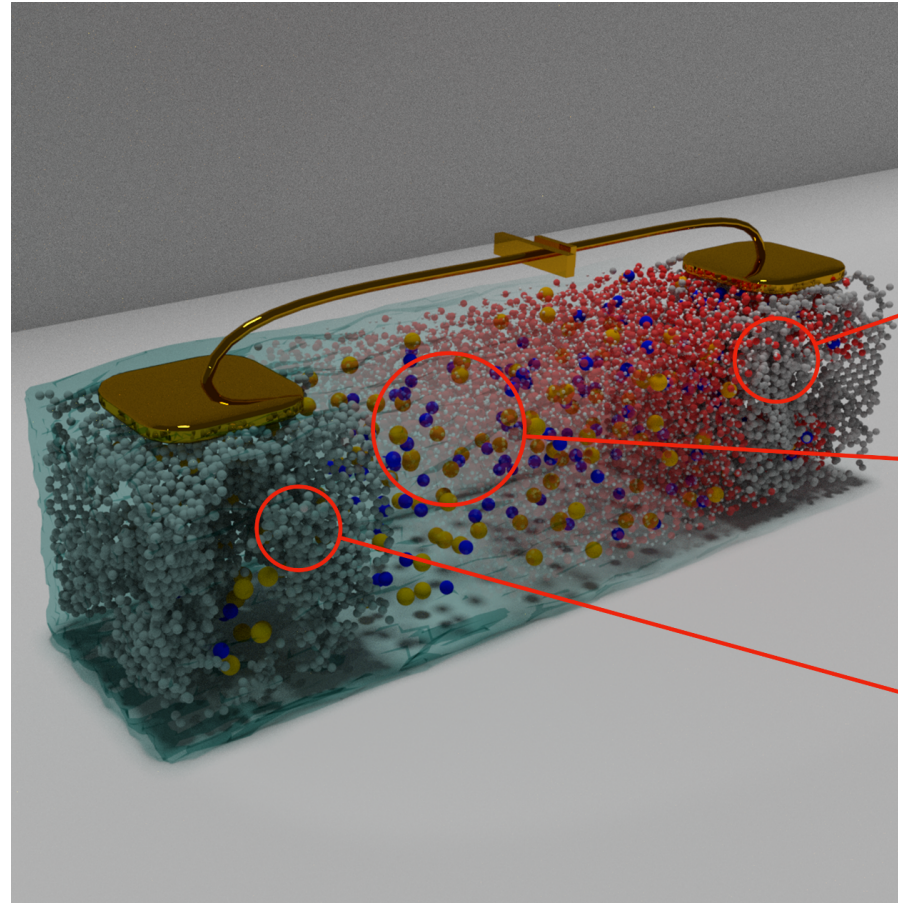
- **16** sodelujočih organizacij
  - ~ Koordinator: **Kemijski inštitut** (prof. dr. Matej Praprotnik)
  - ~ **8 držav** (Slovenija, Nemčija, Italija, Španija, Francija, Belgija, Nizozemska, Norveška)
- Trajanje: 1.1.2023 – 31.12.2026
- Financiranje: 6M€ EuroHPC JU + posamezne države (ministrstvo MVZI)



# 1. Baterije za prehod na trajnostno energijo



- Superkondenzatorji iz ogljika so naprave za shranjevanje energije – odlikuje jih izjemno visoka energijska gostota.
- Napoved in razvoj naprednih materialov zahteva opis na velikih prostorskih in časovnih skalah.



Abundant materials

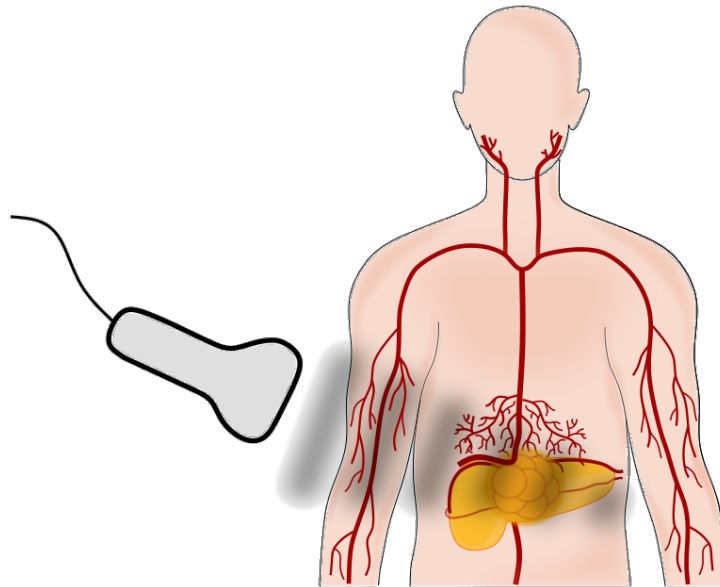
Fast charging devices  
High power

>1,000,000  
charge-discharge cycles

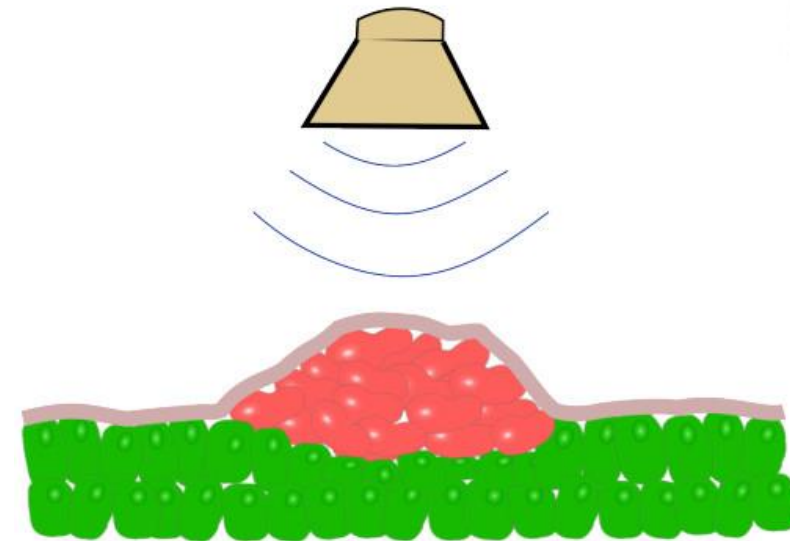
## 2. Uporaba v biomedicini



SLING



Digital Ultrasound Device

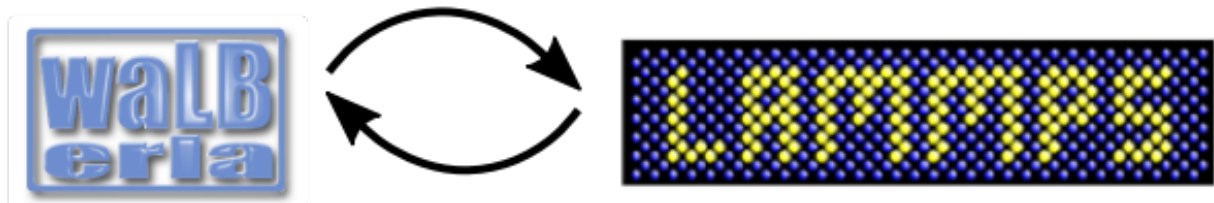
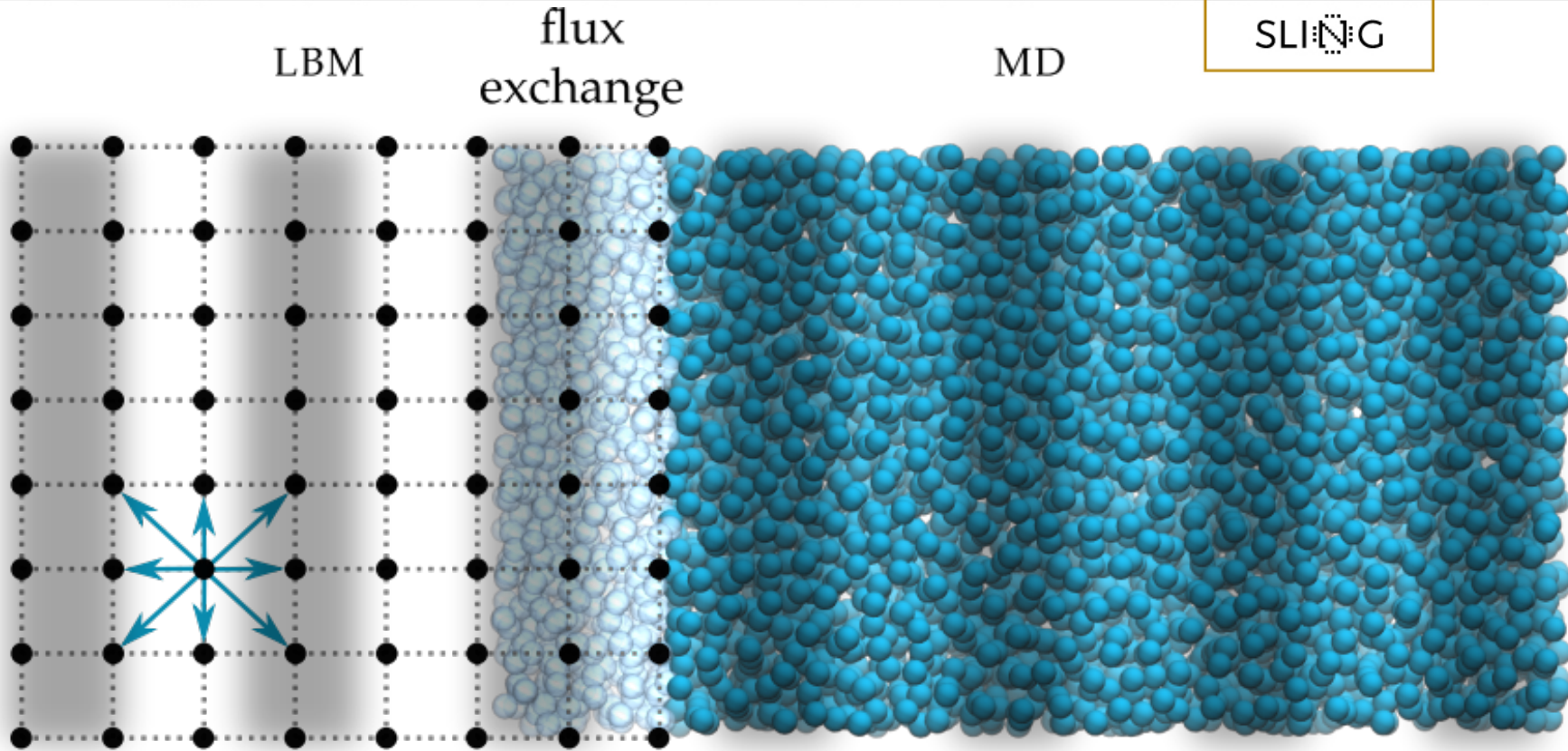


- Razvoj natančnega “digitalnega dvojčna” za ultrazvok.
- Uporaba digitalnega dvojčka za izboljšanje protokolov merjenja: kontrolirano testiranje in racionalna optimizacija parametrov, kot npr. frekvenca in amplituda ultrazvoka.

# 2. Uporaba v biomedicini



- LAMMPS (MD)
- waLBerla (LBM)
- Implementacija novega fix style v LAMMPS kodi.
- Sklopitev na podlagi toka gibalne količine in energije.

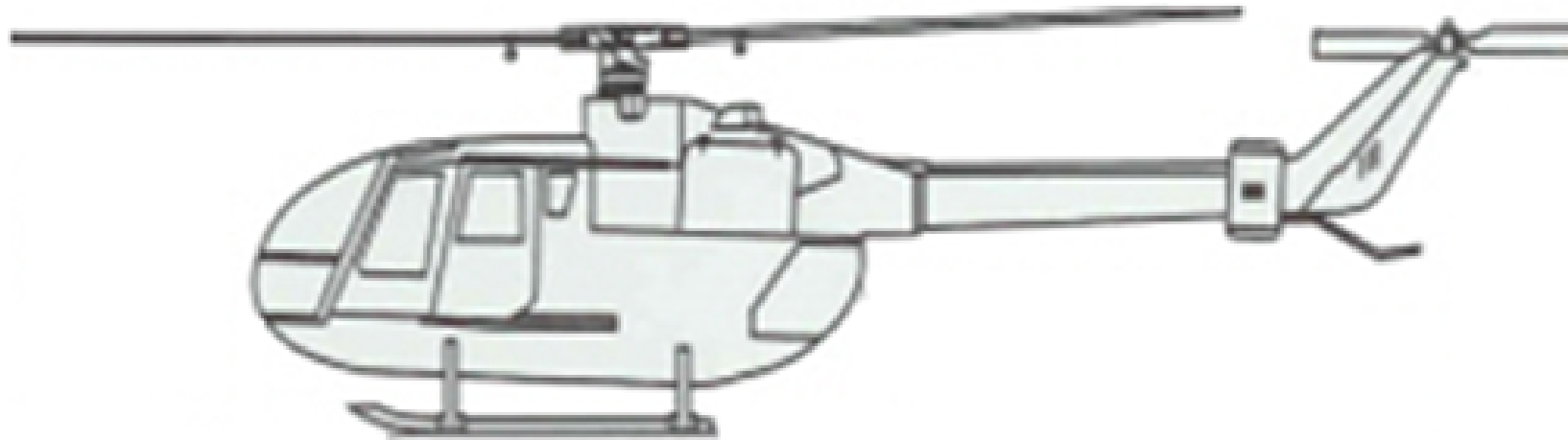


# 3. Razvoj inovativnih helikopterjev za civilni prevoz



SLING

- Iz znanstvenega vidika velik iziv, ki zahteva natančno modeliranje toka okoli helikopterja in podrobno razumevanje mehanskih sil povzročenih med letom.
- Sklopitev med aerodinamiko in strukturnim modeliranjem je omejeno z visoko numerično zahtevnostjo, posebno v primerih premikajočih se teles (npr. rotorjev helikopterja).



# Znanstveni primeri zahtevajo tehnične inovacije



- Omenjeni znanstveni primeri vključujejo **večskalni** opis in zahtevajo uporabo množice različnih metod in programske opreme.
- Izziv je **sklopiti kode** in poskrbeti za **učinkovitost** na večjih skalah.
- Na srečo imamo dostop do najbolj zmogljivih superračunalnikov (**EuroHPC**).
- Dostop ni dovolj. Proces znanstvenega delovnega toka na the superračunalniških virih je potrebno narediti **bolj učinkovitega in enostavnega**.

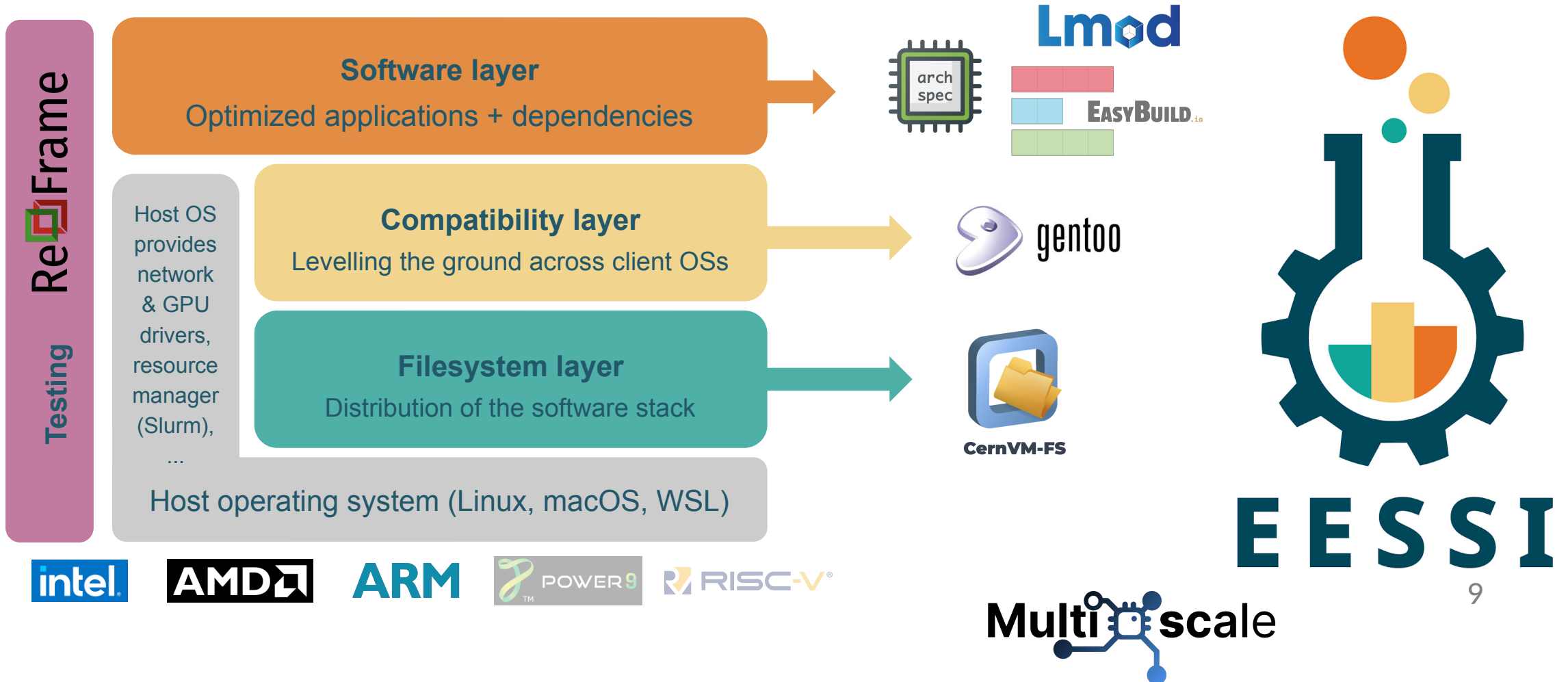




# EESSI



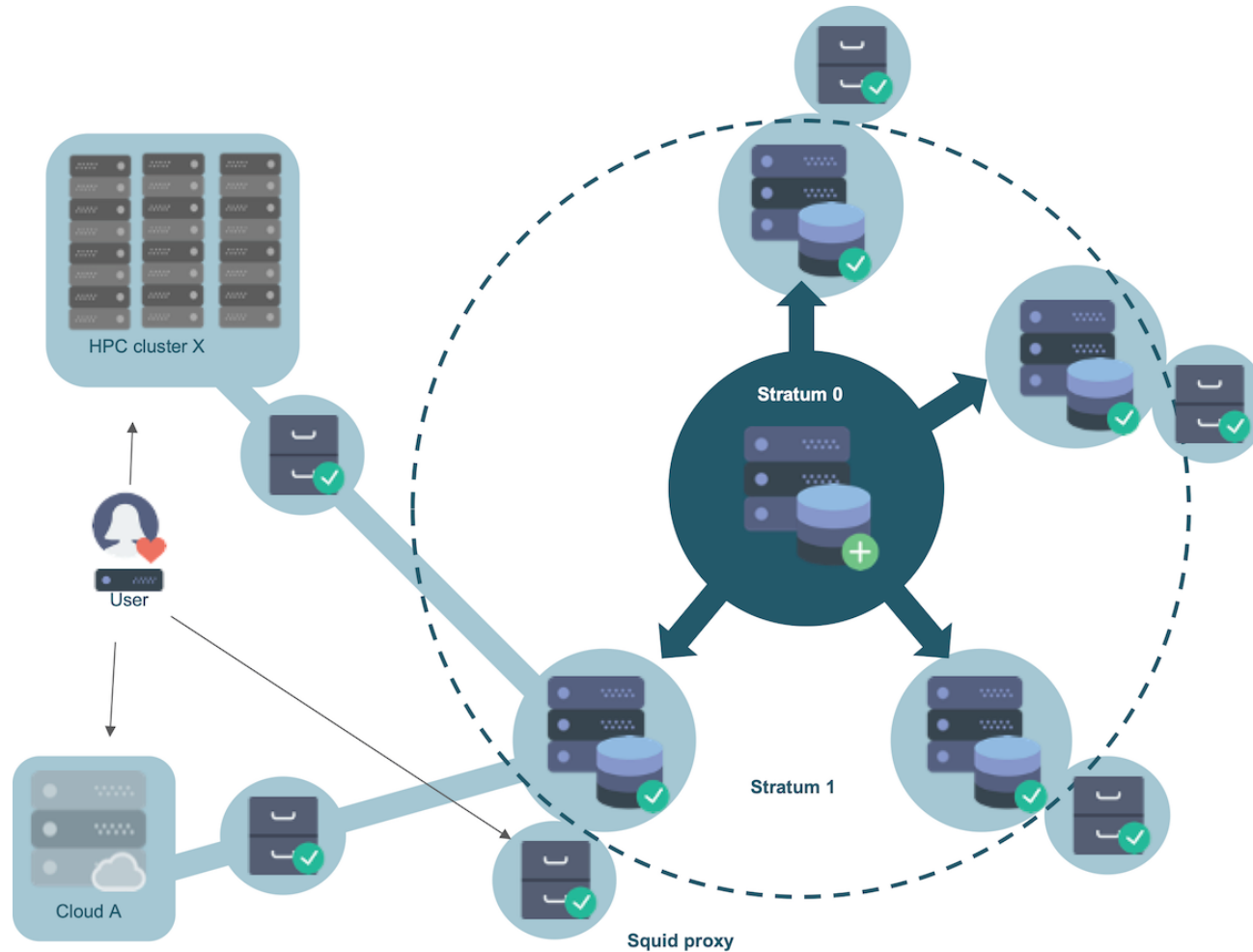
- **E**uropean **E**nvironment for **S**cientific **S**oftware **I**nstallations



# EESSI

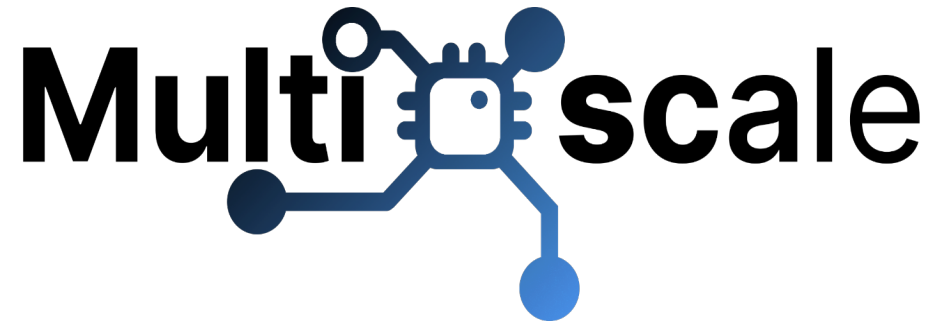


- **E**uropean **E**nvironment for **S**cientific **S**oftware **I**nstallations



Multi**scale**

# Acknowledgments



Web page: [www.multixscale.eu](http://www.multixscale.eu)  
Facebook: [MultiXscale](#)  
Twitter: [@MultiXscale](#)  
LinkedIn: [MultiXscale](#)



Co-funded by  
the European Union



**EuroHPC**  
Joint Undertaking



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA



SORBONNE  
UNIVERSITÉ



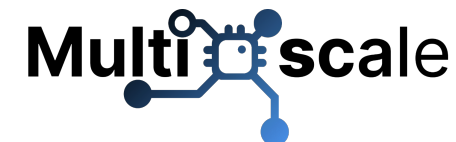
Université  
de Toulouse



Consiglio Nazionale  
delle Ricerche



MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT





# Hvala!

Projekt EuroCC 2 financira Evropska unija. Financiran je s sredstvi Skupnega evropskega podjetja za visokozmogljivo računalništvo (EuroHPC JU) ter Nemčije, Bolgarije, Avstrije, Hrvaške, Cipra, Češke republike, Danske, Estonije, Finske, Grčije, Madžarske, Irske, Italije, Litve, Latvije, Poljske, Portugalske, Romunije, Slovenije, Španije, Švedske, Francije, Nizozemske, Belgije, Luksemburga, Slovaške, Norveške, Turčije, Republike Severne Makedonije, Islandije, Črne gore in Srbije v okviru sporazuma o dodelitvi sredstev št. 101101903.



**Funded by  
the European Union**