

Jakten på framtidens material

Börje Johansson är professor i den kondenserade materiens teori vid Uppsala universitet. Han har en lång vetenskaplig karriär bakom sig. Det är till stor del genom de insatser som hans generation av forskare gjort, som svensk forskning har fått en mycket stark internationell ställning i fältet under de senaste 20 åren. Nu har Uppsala universitet genom medel från vetenskapsrådet (VR) investerat i ett nytt beräkningskluster. Det kommer att hjälpa Börje och hans forskarkollegor att snabbare utveckla framtidens fasta material. Inserve har tillsammans med Sun och AMD varit med och hjälpt till när Uppsala fick större datakraft.

Börje Johansson har en lång vetenskaplig karriär bakom sig och är pionjär inom sitt område, den kondenserade materiens teori. Med hjälp av kraftiga datorkluster beräknar och simulerar man fram framtidens fasta material. Inom den kondenserade materiens teori strävar man efter att förklara och förutsäga fasta materials egenskaper. Ofta innebär det att man beräknar hur elektronerna binder ihop materialet. Det är karaktären hos denna struktur som elektronerna bildar som i grund och botten särskiljer alla olika material.

VAD FINNS I JORDENS INNERSTA?

Uppsala universitet har några av de bästa teoretiska och experimentella forskargrupperna i världen. Man har också några av världens bästa experimentella utrustningar. Börje Johansson ser fram emot att börja arbeta med det nya beräkningsklustret. "Det här stärker vår internationella konkurrenskraft. Det nya klustret kommer dels att snabba på våra forskningsresultat, dels kommer det att öppna upp nya forskningsområden. Ett spännande område är exempelvis frågan om hur jordens mittpunkt ser ut? Många tror att det är en kärna av järnmetall utsatt för ett mycket högt tryck. Det nya klustret kommer här att hjälpa oss öka förståelsen för jordens absolut innersta."

Storskaliga numeriska simuleringar används som en bro mellan teori och experiment. Inom den fysiska institutionen kommer beräkningsklustret att användas för forskning inom bland annat magnetiska metaller, vätgaslagringsmaterial, supraledare, batterimaterial och bränsleceller för hållbar energi. Inom dessa områden har beräkningarna endast kärnladdningen hos de ingående atomtyperna som indata. Det är det enda beräkningsklustret behöver för att beräkna och analysera de nya materialens egenskaper.

FLER NYA FORSKNINGSMOMRÅDEN

Beställare av beräkningsklustret är UPPMAX, Uppsala Multidisciplinary Center for Advanced Computational Science. Det är den teknisk-naturvetenskapliga fakultetens satsning på utveckling och användning av modern beräkningsteknik. Ansvarig för

CASE: UPPSALA UNIVERSITET



Börje Johansson har över 650 publikationer i vetenskapliga tidskrifter, varav inte mindre än tio i Science eller Nature. Den senare siffran visar att hans forskning rörer intresse långt utanför specialistkretsar.

UPPMAX är Sverker Holmgren på Institutionen för informationsteknologi: "Det nya beräkningsklustret kommer att ge oss möjligheter att lösa nya problem inom en mängd forskningsområden. Traditionella ämnen som fysik, biologi och kemi kommer att ha mycket stor glädje av det, men även bioinformatik som kräver enorma statistiska beräkningar kommer att få större möjligheter att snabbare nå resultat. Även vi som arbetar med informationsteknologi kommer att ha nytta av klustret i vår utveckling av beräkningsmetoder och algoritmer."

STIMULERANDE MED UNIVERSITET

Richard Hallin på Inserve beskriver projektet från sitt perspektiv: "Som vanligt är det stimulerande att jobba med universitet och högskolor. De ligger ofta några år före industrin. Dessutom var det en ny utmaning att arbeta med Infinibandtekniken som har en bandbredd på över 800 MB/s och svarstider på under 6 mikrosekunder. Datorerna hade specifikationer som inte fanns i Suns prislista vilket gjorde att vi var tvungna att anpassa konfigurationen, men tillsammans med UPPMAX personal lyckades vi hantera detta på ett bra sätt. I framtiden räknar vi med att applicera den här teknologin på industrikunder som vill göra beräkningskluster. Även om beräkningslösningar kan upplevas handla främst om snabba processorer så är infrastruktur och implementation minst lika viktigt. Dels för att säkerställa maximalt resurssnyttjande, dels för att snabbt komma i gång."

Om arbetet på Uppsala universitet leder till stora banbrytande upptäckter får framtiden utvisa. Klart är dock att här bedrivs forskning i absolut framkant.

FAKTA

Det nya klustret består av 256 CPUer, 96 noder och har en beräkningskapacitet på 1,3 teraflopp per sekund. För att ge en bild av storleken innehåller klustret 1.800 meter kabel, över 2.000 buntband och väger fyra ton – en rejäl pjäs med andra ord. Den är uppbyggd på Suns och AMD:s Opteronsystem med Infiniband som ger supersnabba nätverk på 10 Gbps.



www.inserve.se