

## NODOS DE CÁLCULO AMD ROME PARA QUÍMICA COMPUTACIONAL

A principios de julio del 2020, SIE instaló nuevos nodos para el clúster de Química Computacional de la Universidad de Barcelona. Dicho suministro había sido ganado en un concurso de casi 360.000 euros.

A través de 26 nodos SIE Ladon, basados en plataformas Gigabyte y procesadores AMD Rome, se ofrece al cliente un total de 1.664 cores a 2,9 Ghz y 26 TB de RAM para cálculo científico. Los nodos están integrados a través de una red 10G, conectada a fibra con el exterior y una red gigabit para las comunicaciones IPMI, a través de switches DLINK, que permite manejar las máquinas en remoto con KVM over LAN y a través de la aplicación gratuita GSM (Gigabyte Server Management).

El Instituto de Química Computacional está especializado en varios campos de la química teórica y computacional. La actividad de investigación realizada en el IQTCUB abarca el desarrollo de métodos y herramientas computacionales, la aplicación de varias técnicas de estructuras electrónicas y simulación a problemas en la ciencia de los materiales, el estudio de la reactividad y la dinámica de reacción en reacciones químicas, así como de sistemas biológicos y materia blanda.

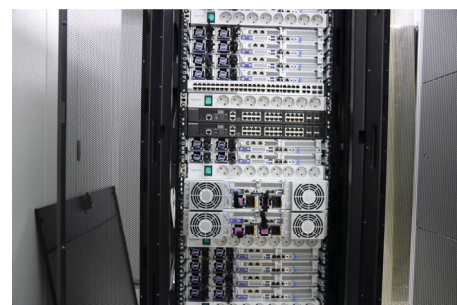
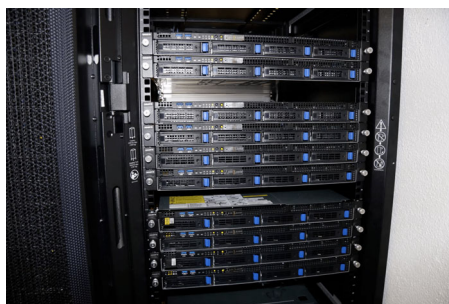
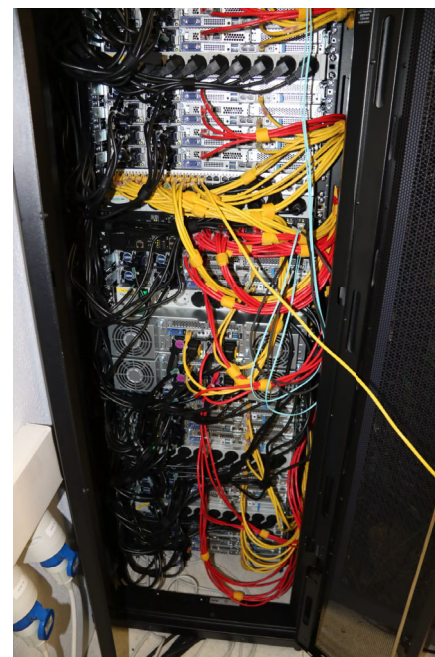
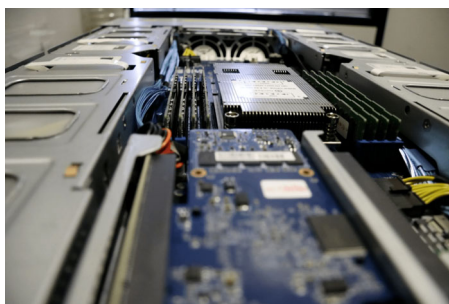
**“...en el centro trabajan con el sistema HPC más de 100 investigadores con una potencia de cálculo global de casi 4000 cores y 37TB de memoria RAM. Ahora añadiendo el nuevo clúster de SIE hemos aumentado considerablemente la potencia de cálculo...”**



Foto de la Universidad de Barcelona.

Según nos dice el administrador Jordi Inglés, en el centro trabajan con el sistema HPC más de 100 investigadores con una potencia de cálculo global de casi 4000 cores y 37TB de memoria RAM. Ahora añadiendo el nuevo clúster de SIE hemos aumentado considerablemente la potencia de cálculo del centro.

Actualmente el instituto está en expansión gracias al galardonado premio María de Maeztu, abriendo el instituto a varios campos de investigación desde la dinámica molecular, inteligencia artificial, machine learning, diseño e impresión de estructuras moleculares en 3D y aplicaciones diseñadas en entornos virtuales para que los investigadores gestionen e interactúen en un entorno 3D con gafas de realidad virtual Oculus.



Fotos del la ampliación del clúster de la Universidad de Barcelona.