

# 35 grups de recerca posen a prova el nou Altix UV 1000

Un cop instal·lat el nou sistema, els investigadors que van sol·licitar-hi hores per a proves han comprovat el rendiment que proporciona a aplicacions com ara Gaussian09, VASP, NWChem, Gromacs, NAMD... amb treballs de fins a 512 processadors. S'han repartit 1.680.000 hores computacionals a 35 grups de recerca tant d'universitats de Catalunya (UB, UAB, URL, UdG i UPF) com de la resta de l'Estat (UV, UPV, UIB i UM), de centres de recerca (CSIC, ICIQ, CRG, IEEC, CIN2, IFAE i CTM) i d'hospitals (HUVH).

Entre els primers investigadors a usar el nou Altix durant el període de proves, perquè el seu programari ja estava instal·lat, hi ha el grup encapçalat per Juan J. Novoa, de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la UB, que té per objectiu determinar el mecanisme de la transició de fase en el cristall magnètic biestable del TTTA. Aquest cristall és un dels prototipus de materials biestables moleculars. El cristall TTTA presenta dues fases, una diamagnètica a baixa temperatura i una paramagnètica a alta temperatura. El grup ha fet córrer en l'Altix dos treballs simultàniament, un per avaluar la transició de l'estructura de baixa temperatura a la d'alta temperatura, i un altre per avaluar la transició a la inversa. Han usat 256 nuclis, 100 GB de memòria i 50 GB de disc amb el codi CPMD, basat en la implementació de la teoria del Funcional de la Densitat que usa ones planes.

El grup liderat per Agustí Lledós de la UAB també ha usat l'Altix per a l'estudi computacional de l'origen de l'enantioselectivitat en la reacció Suzuki-Miyaura. Un dels descobridors d'aquesta coneguda reacció d'acoblament, Akira Suzuki, ha estat guardonat amb el Nobel de Química en

guany. El grup pretén estudiar computacionalment el mecanisme de reacció d'aquesta primera versió enantioselectiva de la reacció de Suzuki per tal d'esbrinar-ne l'origen, que pot ser clau en el procés de disseny de nous catalitzadors que siguin més eficients per les versions asimètriques d'aquesta reacció. Han usat 64 nuclis, 100 GB de memòria i 300 GB de disc amb el programari Gaussian09.

El grup de recerca de Carles Bo, de l'Institut Català d'Investigació Química, també ha provat l'Altix per esbrinar l'estructura molecular de la nanocàpsula d'urani U28. El treball consisteix en el càlcul de freqüències per als àtoms que es troben dins de la nanocàpsula U28, una operació molt costosa computacionalment, sobretot pel que fa als recursos de memòria. Han necessitat 256 processadors, 1 TB de memòria i el programari ADF.

Un altre ha estat el grup d'Eliseo Ruiz de la UB que té per missió l'estudi de la variació de les propietats magnètiques d'imants unimoleculars, en dipositar-los en superfícies metàl·liques, amb possible aplicació en dispositius electrònics, generalment per a emmagatzematge d'informació a nivell molecular. Els càlculs s'han realit-

zat amb 256 processadors i 40 GB de memòria, usant els programaris Siesta i NWChem.

El projecte de recerca participat per Glòria Rodríguez, del Centro de Física de Materiales (CSIC-UPV), ha realitzat simulacions dels processos d'imantació i excitació d'ones d'espín en *arrays* de partícules en estat de vòrtex magnètic. Aquests *arrays* són bons candidats a formar subestructures amb propietats regulables que poden ser utilitzades en la transmissió de senyals electromagnètics sense corrent elèctric, ja que la transmissió del senyal es realitza mitjançant ones d'espín viatjant a través del material. Han usat 32 processadors amb 30 GB de memòria i 300 GB en disc, amb el programari The Object Oriented Micro Magnetic Framework.

Domingo Giménez, de la Universidad de Murcia, ha usat l'Altix per a l'optimització de rutines d'àlgebra lineal densa que s'utilitzen en multitud de problemes científics per a la seva resolució.

Tenen aplicacions reals en medicina i components de radiofreqüència. Han usat 256 processadors i 25 GB de memòria i disc amb les llibreries BLAS, LAPACK i un model de paral·lelització OpenMP. ■

