

## L'Institut de Química Teòrica i Computacional dobla la potència de càlcul

L'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB) ha fet una ampliació del seu centre de processament de dades i ha posat a l'abast dels seus investigadors un nou recurs de càlcul d'altres prestacions, que permetrà duplicar la potència de càlcul actual del centre. Aquesta ampliació permetrà als investigadors continuar amb una recerca de qualitat i competitiva a escala internacional.

El nou sistema, batejat com a IQTC04, disposa d'un total de 72 nodes, equivalents a una potència de càlcul de 1.700 proces-

sadors. Amb aquesta potència el sistema en conjunt passarà a tenir un rendiment punta de 10,5 Tflops (10,5 bilions d'operacions de coma flotant per segon). Actualment, l'IQTCUB utilitza també els serveis de càlcul del Centre de Supercomputació de Catalunya i del Barcelona Supercomputing Center, que ara es podran usar de manera més eficient gràcies al nou recurs.

La nova infraestructura ha estat dissenyada per la Xarxa de Referència de Química Teòrica i Computacional (XRQTC), que gestiona la Fundació Bosch i Gimpera i que agrupa més de

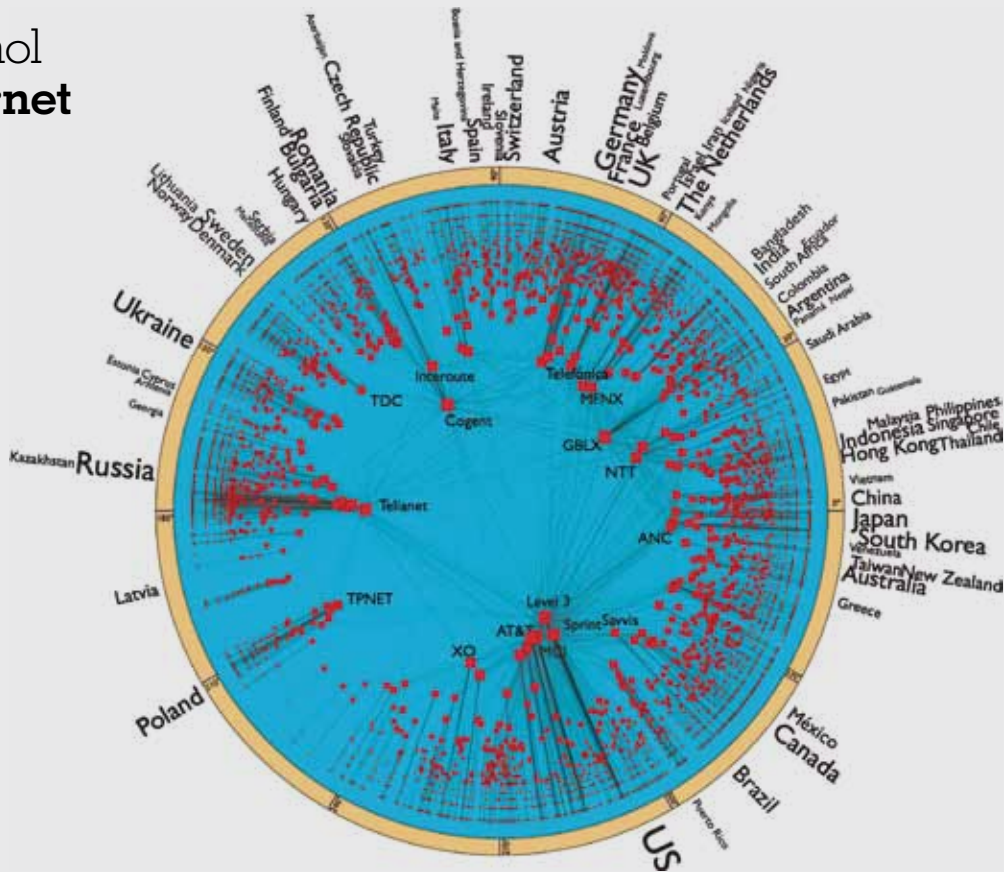
200 investigadors de grups de recerca de diferents institucions catalanes. Gràcies a la col·laboració dels membres de la XRQTC, i a col·laboracions d'investigadors de disciplines properes, ha estat possible aconseguir un conjunt de dades de referència (*benchmarks*) per a les aplicacions més representatives de la XRQTC. Aquest conjunt de dades, de codi lliure, es troben a l'HPC Knowledge Portal, que ha estat desenvolupat pels tècnics informàtics dels centres de càlcul de la XRQTC.

D'aquesta manera, s'ha pogut fer un estudi molt detallat

sobre l'escalabilitat i el rendiment de cada aplicació tenint en compte diferents compiladors, biblioteques de programes i entorns de paral·lelització. Com a resultat d'aquest estudi, s'han obtingut versions d'aquestes aplicacions altament optimitzades per aquesta arquitectura amb l'objectiu d'aprofitar al màxim el nou equip de càlcul.

L'IQTC04 ha permès incorporar un conjunt de nous serveis per facilitar que els usuaris monitoritzin els treballs, com també per donar noves facilitats de càlcul fins ara impossibles de dur a terme al centre. ■

## El plànol d'Internet



En un article aparegut en la publicació d'Internet *Nature Communications* es presenta un mètode per elaborar un plànol amb les coordenades d'Internet que reflecteix les diferents connexions que conformen la xarxa, la qual cosa permetria simplificar el protocol de transferència d'informació actual i millorar-ne l'eficiència. En aquest treball hi ha participat el professor del Departament de Física Fonamental de la UB, Marián Bogañá. ■