

VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y TRANSFERENCIA

EL SECRETARIADO DE INFRAESTRUCTURA CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

INFORMA

SISTEMA DE CÓMPUTO BASADO EN PROCESADORES XEON DE ÚLTIMA GENERACIÓN PARA EL EQUIPAMIENTO DEL INSTITUTO DE COMPUTACIÓN CIENTÍFICA AVANZADA DE LA UEx Y SOFTWARE PARA SU APLICACIÓN EN FLUIDODINÁMICA

El Instituto de Computación Científica Avanzada (ICCAEx) ha incorporado a sus instalaciones un **“SISTEMA DE CÓMPUTO BASADO EN PROCESADORES XEON DE ÚLTIMA GENERACIÓN PARA EL EQUIPAMIENTO DEL INSTITUTO DE COMPUTACIÓN CIENTÍFICA AVANZADA DE LA UEx Y SOFTWARE PARA SU APLICACIÓN EN FLUIDODINÁMICA”** con cargo al proyecto **EQC2018-004181-P** concedido por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades a través de las Ayudas para la Adquisición de Equipamiento Científico-Técnico correspondientes al Subprograma Estatal de Infraestructuras de Investigación y Equipamiento Científico-Técnico (Plan Estatal I+D+i 2017-2020) (convocatoria 2018), cofinanciado por la Agencia Estatal de Investigación (AEI) y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), y la Junta de Extremadura, cuyo Responsable Científico es el investigador **Juan Jesús Ruiz Lorenzo**.

OBJETIVO Y FUNCIONALIDAD DEL EQUIPAMIENTO ADQUIRIDO

Características del equipamiento adquirido

El equipamiento FEDER está compuesto por un cluster de cálculo y el programa FLUENT para simulaciones en Mecánica de Fluidos.

Las características del cluster son las siguientes. Está compuesto por un nodo de administración Xeon Silver 4210 2.20 GHz con 20 cores y 8 nodos de cálculo Xeon Gold 2.60 GHz, cada uno compuesto por 36 cores, lo que dan un total de 288 cores de cálculo. Además cada nodo de cálculo dispone de 192 GB de RAM y 4 GB de swap y la máquina dispone de un total de 55 TB de disco. El sistema operativo es CentoS.

Se adjuntan fotografías del equipo al final del documento.

Valor añadido e impacto científico-tecnológico de la adquisición

La posibilidad de realizar simulaciones numéricas en una infraestructura de nuestro Instituto con el software específico FLUENT relacionadas con la Mecánica de Fluidos, potencia enormemente las capacidades de unos de los grupos que conforman nuestro Instituto de investigación, ya que hacen que este grupo pueda realizar estudios completos de diferentes problemas en Mecánica de Fluidos (ya que, además, disponen de un túnel de viento). Por lo tanto, el valor añadido es muy alto tanto desde el punto científico como en el eminentemente tecnológico.

Además, al estar conformada la máquina por CPUs de última generación, hace que se puedan abordar simulaciones numéricas por el resto de los grupos del ICCAEx. Estas simulaciones, que sin la presencia de esta infraestructura hubiera habido que simular en infraestructuras externas, lo que hubiera conllevado limitaciones de acceso y tiempo disponible, se han podido realizar localmente. Este hecho hace que se hayan podido realizar trabajos, que en otras circunstancias o bien no se hubieran podido

realizar o bien se hubieran diluido en el tiempo su realización. Por lo tanto, el valor añadido de este segundo aspecto es muy alto desde el punto de vista científico.

Técnicas o investigaciones que el equipo permitirá desarrollar o abordar

La adquisición del presente equipamiento ha sido instrumental para la realización de simulaciones en Mecánica de Fluidos (en conjunción del programa FLUENT) tanto en contextos tecnológicos como biomédicos.

Además, ha permitido realizar simulaciones de Dinámica Molecular y Monte Carlo en diferentes áreas de la materia condensada, como los sistemas granulares y los sistemas desordenados.

En particular el programa FLUENT ha permitido y permitirá simular problemas en Mecánica de Fluidos en el cluster de cómputo. Además, al ser el cluster de cómputo de propósito general, se podrá ejecutar cualquier simulación numérica. En particular aquellas relaciones con cualquiera de las líneas de investigación de nuestro Instituto.

Equipo responsable y potencial de utilización por parte de otros grupos de investigación

El equipo responsable está formado por los Profs. Juan J. Ruiz Lorenzo (director del ICCAEx e IP del proyecto FEDER) y Carlos García Orellana.

En la petición original del proyecto FEDER, diferentes grupos externos al ICCAEx mostraron su interés en el uso de la presente infraestructura, en particular, el uso del cluster en conjunción del programa FLUENT para la realización de simulaciones en Mecánica de Fluidos. Actualmente el Prof. Pablo Vidal López, de la Escuela de Ingenierías Agrarias e investigador no adscrito al ICCAEx, ha comenzado a realizar simulaciones usando esta infraestructura.

Producción Científica

Se han publicado los siguientes trabajos científicos:

1. I. Paga et al. Spin-glass dynamics in the presence of a magnetic field: exploration of microscopic properties. *J. Stat. Mech.* (2021) 033301.
2. D. Lopes, R. Agujetas, H. Puga, J. Teixeira, R. Lima, J.P. Alejo and C. Ferrera. Analysis of finite element and finite volume methods for fluid-structure interaction simulation of blood flow in a real stenosed artery. *International Journal of Mechanical Sciences.* 207, pp. 106650. 2021.
3. B. G. Barreales, J. J. Melendez, R. Cuerno and J. J. Ruiz-Lorenzo. Large-scale kinetic roughening behavior of coffee-ring fronts. *Phys. Rev. E* 106, 044801 (2022).
4. J.J. Ruiz-Lorenzo, M. Dudka and Yu. Holovatch. Critical Behavior of the Three-Dimensional Random Anisotropy Heisenberg Model. *Physical Review E* 106, 034123 (2022).
5. J. M. Marcos, P. Rodriguez-Lopez, J. J. Melendez, R. Cuerno and J. J. Ruiz-Lorenzo. Spreading fronts of wetting liquid droplets: microscopic simulations and universal fluctuations. *Physical Review E* 105, 054801 (2022).
6. L.A. Fernandez, I. Gonzalez-Adalid Pemartin, V. Martin-Mayor, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, T. Rizzo, J.J. Ruiz-Lorenzo and M. Veca. Numerical test of the replica-symmetric Hamiltonian for the correlations of the critical state of spin glasses in a field. *Physical Review E* 105, 054106 (2022).
7. A. Megías, A. Santos, and A. Prados. Thermal versus entropic Mpemba effect in molecular gases with nonlinear drag. *Phys. Rev. E* 105, 054140 (2022).
8. A. Megías and A. Santos. Mpemba-like effect protocol for granular gases of inelastic and rough hard disks. *Front. Phys.* 10, 971671 (2022).
9. A. Megías and A. Santos. Kinetic Theory and Memory Effects of Homogeneous Inelastic Granular Gases under Nonlinear Drag. *Entropy* 24, 1436 (2022).

Fotografías



