

Un super computer per la chimica

BASF ha sostituito il sistema Quiriosity installato sei anni fa con un modello più potente, in grado di eseguire tre milioni di miliardi di istruzioni al secondo.

25 maggio 2023 11:32

A fini di ricerca e sviluppo, BASF utilizza computer con elevata potenza di calcolo dal 2017 ([leggi articolo](#)), dopo aver installato presso i laboratori di Ludwigshafen, in Germania, un sistema fornito da Hewlett Packard Enterprise (HPE). Nella sua carriera, la macchina ha svolto una media di 20.000 attività al giorno e viene utilizzato da oltre 400 ricercatori BASF in tutto il mondo.



A sei anni di distanza, il gruppo chimico tedesco ha installato un nuovo supercomputer, destinato a sostituire quello esistente, anche questo fornito da HPE. Rispetto al precedente, la potenza di calcolo è stata quasi raddoppiata passando da 1,75 a 3 petaflop: ciò significa che è in grado di eseguire tre milioni di miliardi di istruzioni al secondo, rendendolo di fatto il più grande supercomputer al mondo utilizzato nella ricerca chimica industriale.

Una tale potenza è necessaria per il calcolo di modelli complessi, esperimenti virtuali e simulazioni di processi chimici. Calcoli che in passato avrebbero richiesto circa un anno di lavoro possono essere eseguiti da un supercomputer in pochi giorni. "Le tecnologie digitali sono tra gli strumenti più importanti per espandere ulteriormente le nostre capacità di ricerca e sviluppo - spiega Melanie Maas-Brunner, Chief Technology Officer di BASF (nella foto a sinistra, insieme con Stephan Schenk, Product Manager High Performance Computing) -. Ad esempio, è necessaria una grande potenza di calcolo per individuare le strutture polimeriche più promettenti tra migliaia di possibilità". "Negli ultimi cinque anni abbiamo lavorato con grande successo utilizzando il nostro supercomputer Quiriosity - aggiunge -. Ci ha permesso di ridurre fortemente i tempi di sviluppo di molecole e composti chimici innovativi e, quindi, di accelerare il lancio sul mercato di nuovi prodotti". "Siamo stati in grado di identificare e sfruttare connessioni precedentemente nascoste per guidare approcci di ricerca completamente nuovi - continua la Chief Technology Officer di BASF -. La modellazione, le simulazioni e gli esperimenti virtuali stanno diventando sempre più complessi e richiedono una maggiore potenza di calcolo. Con il nuovo supercomputer, che è quasi il doppio più veloce, ora possiamo fornire ai nostri ricercatori la potenza di calcolo necessaria".

Costruito da Hewlett Packard Enterprise, battezzato



Curiosity come il suo predecessore, il nuovo sistema di elaborazione utilizza processori AMD (CPU), ha una capacità di memoria pari a 3.000 terabytes e adotta un raffreddamento innovativo ad acqua, che assorbe il calore direttamente dove viene generato e lo trasporta al sistema di raffreddamento, riducendo notevolmente il fabbisogno energetico e, quindi, i costi operativi.

Oltre a Curiosity, BASF prevede di utilizzare la potenza del cloud computing per aumentare ulteriormente la capacità di calcolo. "Questa soluzione ibrida ci offre la migliore flessibilità tecnica e operativa possibile - afferma Maas-Brunner -. consentendoci di gestire richieste che richiedono una potenza di elaborazione eccezionalmente elevata e di lavorare su progetti speciali per i quali il nostro supercomputer non è stato progettato".

© Polimerica - Riproduzione riservata