
Grupo CeM - Recursos computacionais

Tabela 1: Sistemas de computação avançada.

Nome	Ano	Descrição
Dirac	2022	<u>Motherboard:</u> Asus Pro WS WRX80E-SAGE SE WIFI <u>CPU:</u> AMD Ryzen Threadripper PRO 5975WX 32-Core 3.6GHz <u>RAM:</u> 4×32GB, DDR4, 3600 MHz <u>GPU:</u> 2×NVIDIA GeForce RTX 3080 X3, 10GB memória GDDR6X LHR <u>Saídas:</u> HDMI <u>Armazenamento:</u> 1 disco SSD 1TB + 1 disco HDD 8TB
Fock	2018	<u>Motherboard:</u> ASUS TUF X299 <u>CPU:</u> Intel I9 7960X, 16 cores, 2.8 GHz <u>RAM:</u> 8×8GB, DDR4, 2400 MHz <u>GPU:</u> 2×NVIDIA GeForce GTX 2080, 8GB memória GDDR6 <u>Saídas:</u> HDMI <u>Armazenamento:</u> 2 discos HDD 4TB + 1 disco HDD 2TB
Hartree	2017	<u>Motherboard:</u> ASUS Z10PE-D8 WS <u>CPU:</u> 2×Intel Xeon E5-2698 v4, 20 cores, 2.20 GHz <u>RAM:</u> 8×16GB, DDR4, 2133 MHz <u>GPU:</u> 4×NVIDIA GeForce GTX 1080, 8GB memória GDDR5 <u>Saídas:</u> HDMI, DVI-D <u>Armazenamento:</u> 1 disco SSD 250GB + 1 disco HDD 1TB + 1 disco HDD 4TB
Kepler	2013	<u>Motherboard:</u> ASUS Z9PE-D8 WS <u>CPU:</u> 2×Intel Xeon E5-2620, 6 cores, 2.00 GHz <u>RAM:</u> 4×8GB sticks, DDR3, 1600 MHz (+ 4 slots livres) <u>GPU:</u> 2×NVIDIA GeForce GTX 980, 4GB memória GDDR5 2×NVIDIA GeForce GTX 780, 3GB memória GDDR5 <u>Saídas:</u> HDMI, DVI-I <u>Armazenamento:</u> 2 discos HDD 2TB + 1 disco HDD 500GB
Ivy	2013	<u>Motherboard:</u> ASUS P9X79 <u>CPU:</u> Intel I7 4930K, 8 cores, 3.4 GHz <u>RAM:</u> 4×8GB, DDR3, 1333 MHz (+ 4 slots livres) <u>GPU:</u> 2×NVIDIA GeForce GTX 780, 3GB memória GDDR5 <u>Saídas:</u> HDMI, DVI-D, DVI-I <u>Armazenamento:</u> 1 disco SSD 500GB + 1 disco HDD 2TB
Sandy	2011	<u>Motherboard:</u> ASUS P8P67 LE <u>CPU:</u> Intel I7 2600K, 4 cores, 3.40 GHz <u>RAM:</u> 4×4GB, DDR3, 1333 MHz <u>GPU:</u> NVIDIA GeForce GTX 580, 1.5 GB GDDR5 <u>Saídas:</u> HDMI, DVI-I <u>Armazenamento:</u> 1 disco SSD 500 GB + 1 disco HDD 500 GB
Nietzsche	2010	<u>Motherboard:</u> 10(nodos)×ASUS Z8PH-D12/IFB <u>CPU:</u> 2×Intel Xeon E5620, 8 cores, 2.40 GHz <u>RAM:</u> 6×2GB, DDR3, 1333 MHz (6 slots livres) <u>GPU:</u> N/A (Gráficos Integrados) <u>Saídas:</u> VGA <u>Armazenamento:</u> 4 discos HDD 1TB Tecnologia Infiniband (MT47396 Infiniscale-III Mellanox Technologies)

Grupo CeM - Recursos computacionais (cont.)

Tabela 2: Sistemas de armazenamento.

Nome	Ano	Descrição
Crassus	2022	<u>CPU</u> : Intel Xeon E-2224, 4 cores, 4.6 GHz <u>RAM</u> : 8 GB <u>Vídeo</u> : VGA <u>Armazenamento</u> : $2 \times 12\text{TB}$
CloudWD	2018	<u>Armazenamento</u> : $2 \times 4\text{TB}$
FreeNAS	2013	<u>CPU</u> : Intel i3 2100, 4 cores, 3.10GHz <u>RAM</u> : 16 GB <u>Vídeo</u> : HDMI, VGA e DVI-D <u>Armazenamento</u> : $6 \times 2\text{TB}$ em sistema partilhado (ZFS)

Tabela 3: Lista de *software* (usado numa base regular em trabalhos de simulação molecular).

Modelação, visualização, análise

• VMD - Visual Molecular Dynamics; • PyMOL; • jmol; • Vários servidores *on-line* (CHARMM-GUI, Automated Topology Builder - ATB, GLYCAM-Web, etc.).

Códigos de mecânica quântica

• Gaussian 16 (Gaussian, Inc.); • GAMESS-US (General Atomic and Molecular Electronic Structure System); • NWChem (NorthWest computational Chemistry); • ORCA.

Códigos de dinâmica molecular (clássica e ab initio)

• GROMACS (GRONingen MACHine for Chemical Simulations); • AMBER (Assisted Model Building with Energy Refinement); • LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator); • NAMD (NANoscale Molecular Dynamics); • CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics); • CP2K; • SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms).
