

Silicon Graphics y el CESGA - Centro de Supercomputación de Galicia

Le invitan a la charla que impartirá el Dr. Roberto Gomperts sobre **Química Computacional**

CESGA - CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

Av. de Vigo s/n Campus Universitario 15705 Santiago de Compostela

JUEVES 12 DE MAYO DE 10 A 12 HORAS

CHARLA DE QUÍMICA COMPUTACIONAL:

CONTENIDO:

Corta Introducción

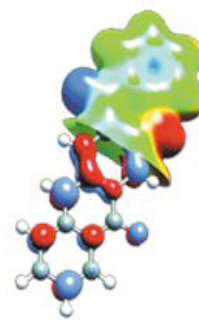
Breve descripción de la arquitectura del servidor Altix y de como diferentes programas de Química Computacional y de Bioinformática se benefician de la misma

Contexto para comprender el comportamiento en paralelo de dichos programas

Discusión acerca de algunos programas : Gaussian, Gamess, VASP, Castep, Dmol3, Adf, Amber, Namd, Charmm, etc

Atención a preguntas de los asistentes.

Plazas Limitadas: Se ruega confirmar asistencia por correo electrónico a: alba@sgi.com



El Dr. Roberto Gomperts, Principal Scientist en SGI, dirige en la actualidad un Grupo de trabajo orientado a optimizar el comportamiento de aplicaciones de Química y Bioinformática – tanto comerciales como Open Source – en las plataformas SGI. Estas plataformas, basadas en procesadores Itanium2 de Intel y el sistema operativo Linux, tiene la particularidad de ofrecer una arquitectura NUMAflex que permite compartir eficientemente memoria entre decenas y hasta centenares de procesadores.

El Dr. Gomperts ha sido el autor de la primera versión paralela autorizada de Gaussian y es considerado co-autor de la aplicación. El Dr. Gomperts también ha estado involucrado en las implementaciones “High-Throughput” de varios códigos Bioinformáticos: BLAST, FASTA, CLUSTAL, etc.

El Dr. Gomperts sigue activamente aportando ideas a la comunidad científica: ha publicado nueve artículos en revistas científicas de renombre a lo largo de los últimos cuatro años. El Dr. Gomperts se incorporó a SGI 14 años atrás. Con anterioridad había trabajado durante 3 años como Ingeniero en Alliant Computer Systems, antes estuvo 2 años como investigador post-doc en IBM trabajando en sistemas paralelos experimentales y, a lo largo de 5 años, también estuvo como profesor en la Universidad de Zulia en Maracaibo, Venezuela.

