
SIESTA é a aplicación máis usada no CESGA

- Last Updated (19.02.2010)

SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms), programa para realizar cálculos de estrutura electrónica e simulacións de dinámica molecular ab initio en moléculas e sólidos, é actualmente a aplicación máis usada no CESGA. Aproximadamente o 17% do tempo de CPU dispoñible nos servidores de cálculo do CESGA durante o ano 2009 foi empregado realizando simulacións onde as técnicas implementadas por SIESTA constituían a base do cálculo.

As seguintes aplicacións suman entre elas máis do 50% das horas consumidas durante o 2009:

SIESTA (17%) Gaussian 98/03/09 (12%) Parsec (9%) VASP (6%) Gromacs (4%) NAMD (3%)

Estas aplicacións céntranse nas áreas de física do estado sólido (SIESTA, Parsec e VASP), química cuántica (Gaussian 98/03/09) e dinámica molecular (Gromacs e NAMD). É unha tendencia clara, non só neste último ano, se non no que levamos de século que as áreas de modelado molecular e física do estado sólido están a superar en uso ás de pura Química Cuántica aínda que a fronteira algorítmica que as separa non é en absoluto clara mesturando nos diferentes paquetes algoritmos propios das 3 áreas.