
O CESGA colabora na execución dun test Grid con participantes españois e iberoamericanos

- Last Updated ()

O CESGA participou nas probas dunha nova aplicación Grid capaz de determinar de forma automática hipersuperficies de enerxía potencial molecular. Dita aplicación permite o tratamento de moléculas de tamaño arbitrario.

A información xerada pola ferramenta a partir dos resultados discretos de cálculos de estrutura electrónica molecular, normalizada e organizada grazas ao uso dunha linguaxe para espectroscopia molecular (MSML) baseado en XML, permitirá a construción de modelos roto-vibracionais moleculares precisos e fiables.

O desenvolvemento da ferramenta Grid e a linguaxe MSML realizouse no Grupo de Química Computacional e Computación de Alto Rendemento (QCyCAR) da Universidade de Castela-A Mancha. O proceso de paralelización en Grid foi posible grazas ao uso do contorno de programación Grid superscalar, desenvolvido polo grupo de Grid Computing e Clusters do Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS).

O test involucrou a interconexión Grid do Centro de Supercomputación de Galicia coa Universidade de Castela-A Mancha, co BSC-CNS e coa Universidade de Póvoa en México. No test utilizouse a molécula de formaldehído protonado (molécula de interese astrofísico), realizando a paralelización en Grid de 45385 cálculos de estrutura electrónica.

A proba supuxo o aforro dun 95% de tempo de cálculo fronte a un sistema monoprocesador convencional. Por outro lado, o test proporcionou importante información sobre os problemas asociados tanto ás conexións TCP/IP como aos sistemas de planificación en probas de gran tamaño como a presente.