

Propuesta para la Creación de un Programa de e-Ciencia

Área Temática de Química Computacional

Introducción

La Química Computacional consiste en la modelización cuantitativa de fenómenos de interés químico usando métodos y técnicas computacionales. Las líneas más relevantes inmersas en este área son:

- Descripción cuántica molecular (englobando la tradicional Química Cuántica): Estructura electrónica, movimiento nuclear, reactividad química, caracterización molecular, espectroscopia electrónica y roto-vibracional, semejanza molecular cuántica.
- Dinámica molecular (Resolución de las ecuaciones del movimiento de sistemas moleculares con aproximaciones cuasiclásicas, semi-clásicas o cuánticas): Dinámica de reacciones, cálculo de secciones eficaces de reacción, reactividad química.
- Mecánica molecular (Aplicación de la mecánica clásica con potenciales interatómicos adecuadamente parametrizados): Estructura 3D de macromoléculas, interacciones ligandoreceptor

Los métodos y técnicas de la Química Computacional se aplican (entre otras posibilidades) a:

- Predicción e interpretación de estructuras moleculares.
- Modelización de reacciones químicas.
- Predicción e interpretación de espectros electrónicos y rotovibracionales.
- Identificación de especies en el espacio interestelar por medio de sus patrones roto-vibracionales.
- Modelización de reacciones complejas en modelos de química atmosférica, de combustión de hidrocarburos, o de nubes interestelares.
- Molecular docking entre ligandos bioactivos y sus receptores macromoleculares.
- Diseño de novo de ligandos bioactivos.
- Estudios de estado sólido.

• Motivación y oportunidad del uso del grid en el campo

Existe una importante necesidad de recursos para computación de alto rendimiento, que permitan una optimización de recursos hardware y software existentes. Además la posibilidad de crear organizaciones virtuales resulta muy adecuada para la aglutinar y coordinar el acceso a los recursos para la resolución de los grandes problemas del área. Además, el acceso al Grid permitiría abordar nuevos problemas de mayor complejidad.

Estudio de necesidades y proyectos de la comunidad.

En el área de Computación de alto rendimiento se han identificado las siguientes necesidades:

- Necesidad de altas exigencias computacionales en cuanto a potencia de cálculo, y en algunos casos en cuanto a espacio en disco (como en problemas de estructura electrónica).

- Utilización de herramientas ya paralelizadas: Se sacaría partido de su instalación en el entorno grid, pero la heterogeneidad inherente en el sistema y su paralelización, obedeciendo a un paradigma de paralelización fina, limitaría su uso a nivel de los sistemas multiprocesadores (incluyendo cluster de computadores) integrados en el grid. Ejemplos de estas herramientas son los paquetes de estructura electrónica Gamess, NorthWest Chem o Siesta.

Por otro lado se persigue la optimización de recursos hardware y software existentes, dado

- Los recursos computacionales no se utilizan al 100% el 100% del tiempo.
- Un grid con un alto número de nodos proporciona una gran cantidad de recursos libres a lo largo del tiempo, tantos más cuanto mayor es el grid.
- El entorno grid, por lo tanto, permitiría abordar el tratamiento de problemas con alta exigencia en recursos computacionales a grupos muy capacitados pero con insuficiente infraestructura propia.

Desarrollo previsto de middleware específico del área

Además del desarrollo de aplicaciones piloto, existe una necesidad de herramientas middleware para:

- Permitir la creación de portales web personalizados para cada organización virtual (como el GridPort toolkit de NPACI) .
- Programación paralela sobre el grid, con la ayuda de herramientas como GRID superscalar y GridWay.
- Adecuación al estado dinámico del sistema (sistemas autoadaptativos)
 - Monitorización dinámica de trabajos, recuperación automática de fallos, recopilación automática de resultados parciales en el grid, integración y análisis automático de los mismos.
 - Punto clave de los nuevos modelos: Generación de grandes cantidades de información sobre el grid que debe ser transferida, filtrada, interpretada y organizada de forma automática.

Definición de posibles proyectos piloto.

La utilización de Grid en este ámbito no sólo permitiría compartir recursos sino cohesionar a la comunidad científica. Por un lado, sería deseable la creación de organizaciones virtuales, con el objetivo de hacer disponible un entorno virtual que permita la colaboración de grupos con similares líneas de investigación. De esta forma se obtendría mayor eficacia y difusión de los esfuerzos individuales al integrarse en una base de conocimiento común y una mayor facilidad para la organización de proyectos coordinados a nivel nacional y europeo.

En lo referente a nuevos problemas de alta complejidad, potenciales proyectos pilotos son:

- Nuevos problemas complejos exigen el desarrollo de nuevas herramientas de modelización.
- La programación sobre paralelismo grueso saca partido de la estructura granular y heterogénea del grid. Ejemplos de aplicación:
 - Exploración de hipersuperficies de energía potencial para dinámica molecular, reactividad química o estructura roto-vibracional.
 - Cálculo de trayectorias en dinámica de reacciones.

Finalmente, se pueden resumir las acciones a realizar en los siguientes pasos:

- Desarrollo de prototipos de herramientas en paralelismo grueso para realizar pruebas de carga reales sobre un entorno grid.
- Para los casos anteriores, desarrollo de los modelos teóricos de rendimiento del sistema. Estos modelos serían de utilidad para el análisis de los resultados obtenidos y la planificación de tareas.
- Integración de varios grupos de investigación en un modelo de organización virtual. El punto clave sería la modelización de una base de información común de la organización (consideraciones de autenticación, duplicidad de información y procesos de actualización).
- Desarrollo de un prototipo modelo de portal web que actúe de interfaz transparente entre los usuarios de la organización virtual y los recursos del sistema.

Grupos Participantes

A continuación se citan algunos de los grupos más relevantes en el área:

- Grupo de Química Computacional y Computación de Alto Rendimiento de la Universidad de Castilla-La Mancha (Camelia Muñoz Caro, Alfonso Niño Ramos, Sebastián Reyes Ávila)
- Grupo de Dinámica Molecular de Reacciones Químicas de la Universidad del País Vasco (Ernesto García Para, Maite Martínez González)
- Departamento de Química-Física, Universidad de Valencia (Raúl Crespo Crespo)