

El Grid Computacional en Espectroscopia Molecular

Mgter. María Eugenia Castro Sánchez



El mundo de la computación cambia muy rápidamente. Actualmente, las tecnologías involucradas en el área de la informática avanzan a pasos agigantados y se utilizan enormemente en áreas multidisciplinarias- astrofísica, química computacional, espectroscopia molecular, informática medio ambiental, etc. En este contexto, una aplicación de esta tecnología que está siendo imprescindible en la actualidad en numerosos campos científicos es el Grid computing o Grid computacional. Los expertos en diferentes áreas de las Ciencias están apostando cada vez más por utilizar este sistema distribuido, que permite acceder a aplicaciones y datos, y compartir recursos geográficamente distribuidos de forma coordinada y transparente por medio de Organizaciones Virtuales (Virtual Organization, VO). Una organización virtual implica la coordinación de varios grupos de trabajo nacionales y extranjeros interesados en la resolución de problemas dentro de un área de interés común. Es el caso específico del Grupo de Investigación de Química Computacional y Computación de Alto Rendimiento de la Universidad de Castilla La Mancha (UCLM), liderado por los Drs. Camelia Muñoz Caro y Alfonso Niño Ramos, que pertenece a una Organización Virtual de Química Computacional.

Dicha organización está interesada en la resolución de problemas en el área de la física molecular y de la espectroscopia molecular, específicamente en la construcción de modelos para estudiar los movimientos de rotación y vibración en moléculas de tamaño arbitrario. Uno de los elementos claves en esta línea es la determinación de la variación de energía potencial con el movimiento molecular. En nuestro grupo hemos propuesto un método automático para determinar en el Grid la variación de energía como función del cambio de la estructura de la molécula. A partir de esta exploración se construyen modelos para estudiar los movimientos de rotación y vibración. En particular, hemos propuesto una metodología para calcular la contribución de la energía cinética al sistema. Dicha metodología la implementamos a través de algoritmos desarrollados en lenguaje de programación C++, que es un lenguaje muy eficiente para computación científica.

Entre los algoritmos desarrollados hemos implementado un método para calcular con precisión las derivadas numéricas necesarias en el cálculo de la energía cinética. Actualmente, estamos trabajando en la implementación de nuevos algoritmos para la simplificación de los estudios de rotación-vibración con diferentes tipos de coordenadas.

Como sistemas de estudio hemos elegido moléculas de interés astrofísico de diferentes tamaños como el formaldehído protonado, el acetaldehído, el glicolaldehído, el metil formato, el metil étil éter y los hidrocarburos policícloaromáticos. De estas moléculas podemos aportar datos para su búsqueda e identificación en el espacio interestelar.

En nuestra línea de trabajo algunas simulaciones pueden llegar a generar cientos de miles de trabajos. Aquí resulta fundamental contar con una infraestructura de hardware y software lo suficientemente potente que permita mayor potencia de cálculo, almacenamiento y aprovechamiento de recursos, combinando nuestros propios recursos con los recursos de otras organizaciones que pertenecen a nuestra VO. Dichas características nos las ofrece el Grid computacional.

Para mayor información sobre nuestro grupo consulte <http://qcyca.inf-cr.uclm.es>

La autora es investigadora del Grupo QcyCAR de la Universidad de Castilla-La Mancha

