

Código Abierto en Química Computacional

Dr. Marcos Rivera Almazo

Contacto: mrivera@itz.uam.mx



Versión en línea



<https://molecular-mar.github.io/openCh>

Contenido

- Código abierto
- Casos
 - Dinámica Molecular
 - Química Cuántica
 - Visualización

Pero primero...

CEUAMI: 20 años

CEUAMI: 20 años



CEUAMI: 20 años



CEUAMI: 20 años



CEUAMI: 20 años

The collage includes:

- A banner for the "Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa" featuring the logo and the text "Casa abierta al tiempo".
- A man standing next to a banner for "CEUAMI 10 AÑOS" which includes the logos for IE and CBI.
- A graphic for CEUAMI's 10th anniversary with the text "CEUAMI está de fiesta, ¡CUMPLIMOS 10 AÑOS! y queremos celebrarlo contigo". It features a cartoon character holding a computer monitor displaying binary code (101001 001010 110001).
- A QR code.
- A small photo of a group of people posing outdoors.
- Text at the bottom: "¿Puedes contar hasta 31 con una sola mano?", social media links (@ceuami, /ceuami), the years "2004-2014", and the website "turing.itz.uam.mx".

CEUAMI: 20 años



Código abierto

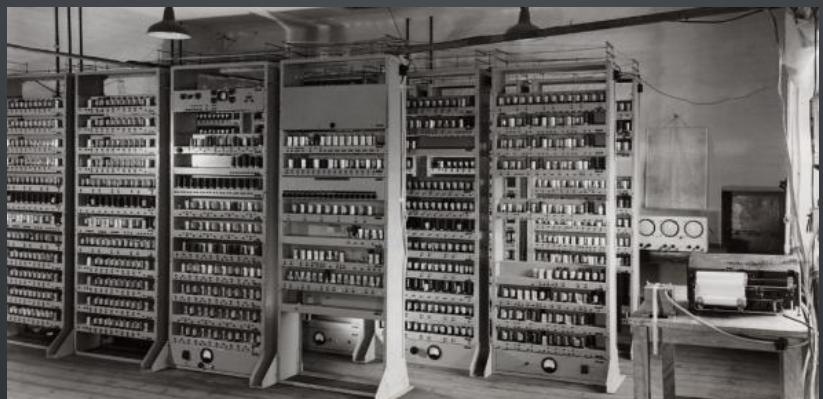
- Termino propuesto en los 90's. Software que cumpla con:
 - Acceso libre al código
 - Modificable
 - Redistribuible
 - Descentralizado



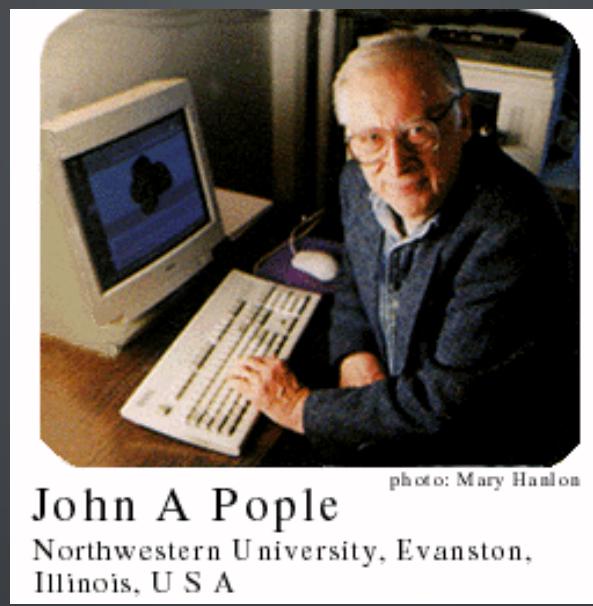
Química Computacional

- Uso de herramientas computacionales para la resolución de problemas químicos
- Primeros usos, junto con las primeras computadoras digitales (40's)

EDSAC, Universidad de Cambridge



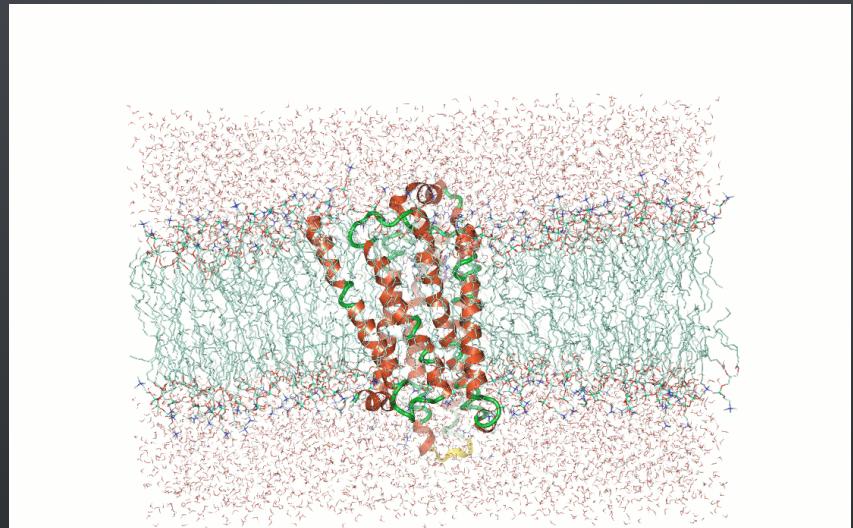
- Programas más eficientes en los 70's (G)
- Inicios *abiertos*: códigos accesibles mediante (tarjetas perforadas, diskets, cd, FTP).
- Favoreció el desarrollo: probar ideas, corregir errores.



Algunos ejemplos:

Dinámica Molecular

- Simular el movimiento y comportamiento de moléculas.
- Efectos de fuerzas por molécula (distancia y entre ellas).
- Campos de fuerzas

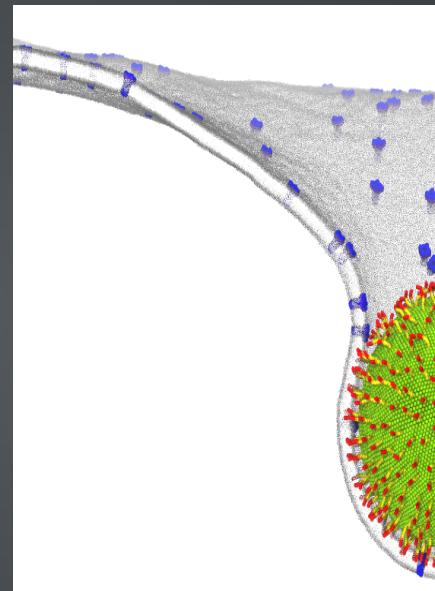
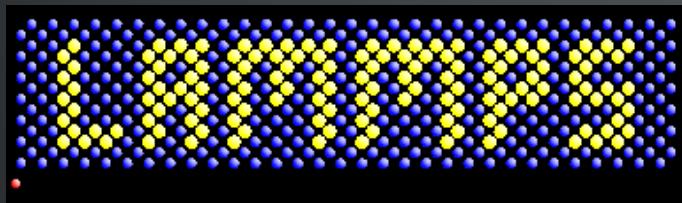


Códigos:

- GROMACS: 1991, Groeningen, Holanda Group.
- Ampliamente usado para sistemas biológicos.
- Ejecución en CPU/GPU.

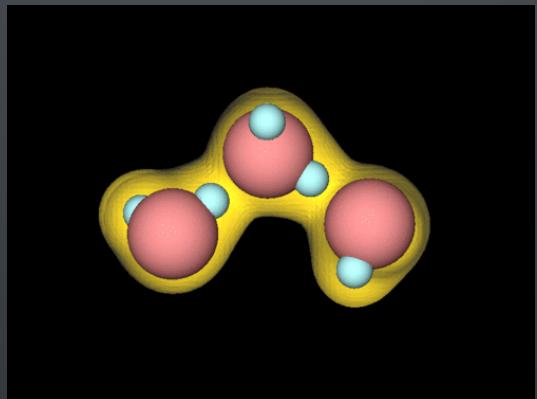
FAST. FLEXIBLE. FREE.
GROMACS

- LAMMPS: 90's, Sandia Laboratory, EU.
- Masivamente paralelizable (MPI, OpenMP, GPU)

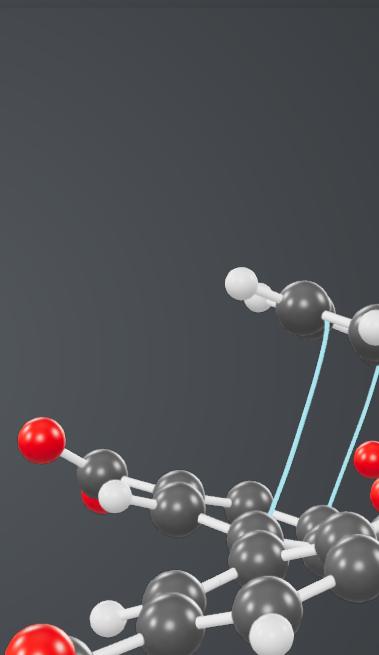
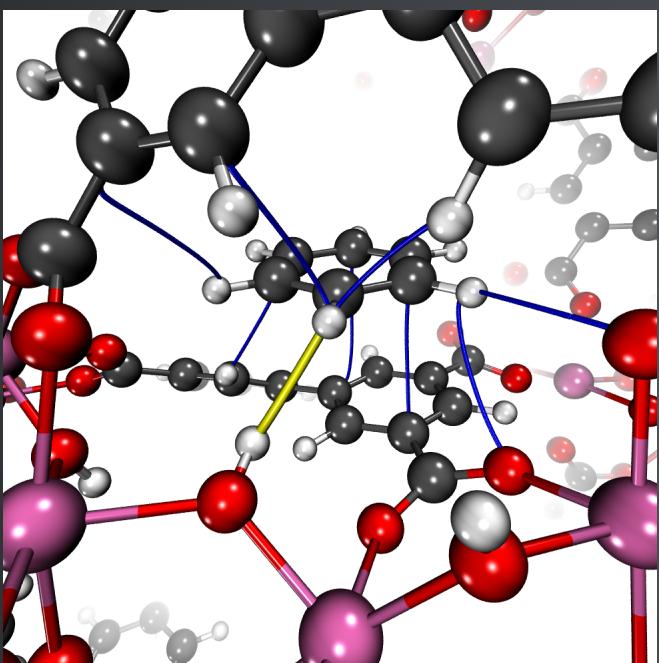


Química cuántica

- Describimos el comportamiento de los electrones.
- Protagonistas en Química (enlaces).
- Descripción a nivel cuántico.
- Alta precisión, alto costo computacional.



Ejemplo: interacción Benceno-M



Rivera-Almazo, M. et al. Isostructural MFM-300(S)
MFM-300(In): Adsorption Behavior to Determine Their
J. Phys. Chem. C 300, (2022).

Algunos ejemplos



NWCHEM
HIGH-PERFORMANCE COMPUTATIONAL
CHEMISTRY SOFTWARE

- NWChem: 1992, PNNL, EU.
- Diversos métodos: DFT, CC, MD.
- Escalable: amplio uso en supercómputo

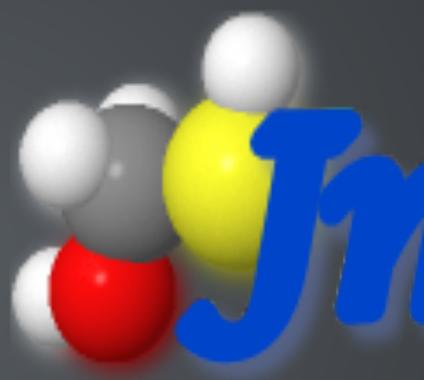
- Otros ejemplos:
 - CP2K, Quantum ESPRESSO, SIESTA,
- Para moléculas, sistemas periódicos (por superficies, cristales).

Visualización

- Auxiliares para interpretar/comunicar simulaciones/experimentos.
- Avogadro: 2007.
- Algunas capacidades:
 - Visualizar archivos *moleculares*
 - Construir/editar moléculas
 - Dinámica molecular básica



- Jmol: 2000's
 - Visualizar dinámicas
 - Animaciones
 - Basado en Java.
Puede usarse en el navegador.
 - Lectura de una gran variedad de formatos



Beneficios del código abierto

- Accesibilidad
- Plataformas para desarrollo
- Implementaciones tempranas
- Comunidad

¿Cómo contribuir?

- GitHub
- GitLab
- Google Summer of Code

¡Gracias por la atención!
¿Preguntas?

<https://linktr.ee/malmazo>

