

LA INFORMATICA EN LA QUIMICA

Kim Morla Ch., Víctor Motta Ll.

ANTECEDENTES

Los lenguajes de programación científica encierran un enorme potencial orientado especialmente a aquellos trabajos, que involucran un procesamiento de gran cantidad de datos, operaciones de gran exactitud y capacidades gráficas.

En los años 60's los primeros lenguajes de programación creados especialmente con fines u orientaciones científicas fueron el FORTRAN (Formula Translation) y el PL1 (Programming Language 1).

Los requerimientos de un lenguaje de programación más "amigable" (más fácil de manejar) y estructurado, pero que a su vez siga preservando su potencia de procesamiento, da lugar a la aparición del lenguaje de programación PASCAL.

El escenario, a fines de los años 70's presentaba a un mundo sacudido por el vertiginoso desarrollo de la electrónica y la informática conjuntamente, haciendo surgir a cada instante nuevos computadores más pequeños, más económicos y de mayor capacidad de procesamiento.

Los requerimientos satisfechos por FORTRAN, PL1, PASCAL, poco a poco eran desbordados por otras necesidades de programación, que las nuevas versiones de los lenguajes en moda no lograban cubrir por completo.

Fue así, como hace su estreno uno de los lenguajes de programación más potentes de su género, el lenguaje de programación "C". No sólo cubrió requerimientos de programación científica, sino que sirvió de base para la aparición de los lenguajes de cuarta generación en el bisoño ambiente de las microcomputadoras, que para inicios de los años 80's ingresaban con gran fuerza.

En la actualidad, al referimos de lenguajes de programación u otros "softwares", es necesario saber dónde estamos ubicados. Por un lado, está el grupo de computadoras grandes (Minicomputadoras, MAINFRAMES, Supercomputadoras), donde los lenguajes de programación funcionan en versiones denominadas "standards". El título de "standard" se debe básicamente al hecho de que los lenguajes de programación de un Minicomputador, o una MAINFRAME, o una Supercomputadora, no difieren considerablemente ("C" standard, Pascal standard, Fortran standard). En otras palabras, un programa hecho en Pascal standard puede funcionar tanto en un microcomputador, en una MAINFRAME o en una Supercomputadora.

Por otro lado, las microcomputadoras cuya potencialidad ha crecido vertiginosamente, ya sea por la eficiencia o sofisticación de "hardware", presentan lenguajes de programación mucho más elaborados, estructurados y "amigables".

A continuación se presenta una relación de los lenguajes de programación más recientes y sus principales atributos para microcomputadoras.

<i>Lenguaje</i>	<i>Versiones</i>	<i>Atributo</i>
C	Turbo C++ Quick C	Lenguaje Científico
Pascal	Turbo Pascal 6.0 Quick Pascal	Lenguaje Científico
Modula	Modula 2	Lenguaje Científico
LISP	Lisp	Lenguaje de Inteligencia Artificial
Prolog	Turbo Prolog	Lenguaje de Inteligencia Artificial

TRABAJO CIENTÍFICO

El trabajo de un científico es una labor que requiere de perseverancia, orden e ingenio. El mundo de hoy le brinda a tal personaje, adicionalmente otras herramientas para lograr sus objetivos iniciales.

1. Avance tecnológico

El “hardware” juega un papel muy importante pues su evolución en los últimos años (que ha sido espectacular) ha permitido desarrollar software cada vez más sofisticado. Esencialmente, un microcomputador es valorado por su velocidad de procesamiento, esto depende básicamente del “microprocesador” instalado en tal máquina (la velocidad de procesamiento se mide en Hertz). Los microprocesadores instalados en los microcomputadores van evolucionando rápidamente y generalmente las modificaciones se dan sobre modelos anteriores, generando lo que se conoce como las familias de microprocesadores. Tal es el caso de la familia de microprocesadores INTEL usados en las microcomputadoras IBM-Compatible.

<i>Procesadores</i>	<i>Velocidad de Procesamiento</i>
INTEL 8088 (“XT”)	8-10 MHz
INTEL 80286 (“AT”)	12-15 MHz
INTEL 80386SX	15-20 MHz
INTEL 80386	20-22 MHz
INTEL 80486	25-33 MHz
INTEL 80586	33-? MHz

Otra familia conocida de microprocesadores para microcomputadoras son las MOTOROLA, que son usadas por las máquinas Macintosh (Motorola 68000, 68020, 68030, 68040).

2. Aplicaciones

El científico, por naturaleza, maneja mucha información, la cual necesariamente tiene que ser ordenada y acumulada de manera tal, que el acceso a dicha información sea fácil y rápido. Caso contrario, la experiencia rica de un investigador no podría condensarse y volcarse a los libros, publicaciones o revistas.

Los manejadores de "base de datos" cuyo origen no se encuentra estrictamente en necesidades científicas, sino más bien comerciales, representa una gran ayuda al científico que necesita manejar bastante información.

Los manejadores de base de datos brindan lenguajes de programación más sencillos y prácticos que los lenguajes científicos de programación conocidos, razón por la cual están enmarcados dentro del grupo de lenguajes denominados de "cuarta generación".

D-Base III	(Microcomputador)
FoxPro	(")
Clipper	(")
Paradox	(")
Informix	(")
Structured Query Language SQL	(Mainframe)

En otro aspecto, los reportes, informes o publicaciones son ciertamente trabajos laboriosos para cualquier químico, sin lugar a duda, pues involucran detalles tipográficos difíciles de reproducir en una hoja de texto. Existen, por esa razón, softwares de trazado de gráficos químicos, que brindan la posibilidad de crear fácilmente una amplia gama de representaciones gráficas de estructuras moleculares y reacciones químicas. Softwares, que sitúan de forma automática los átomos y los enlaces "lógicamente", que entienden sobre aromaticidad, incluso reconociendo los límites de valencia y avisando si se excede algún límite.

El ISIS/Draw es un ejemplo de este tipo de software. ISIS/Draw trabaja bajo un entorno de ventanas ("windows") y suele estar interfazado con procesadores de texto, tan conocidos como el "Microsoft Word for Windows". Trabaja en microcomputadoras IBM-Compatibles.

La fisico-química especialmente necesita mucha ayuda en el procesamiento de datos experimentales, tanto para la determinación de constantes, descripción de funciones de energía, etc., necesitándose de este modo softwares que puedan hacer este tedioso proceso de datos, pero que a la vez estén especializados en este campo.

Por ejemplo, el CHARMM es una poderosa aplicación que modela comportamientos dinámicos y característicos de sistemas moleculares, usando funciones de energía empíricas. Incorpora además los efectos de solvente, tem-

peratura y datos experimentales, incluyendo datos RMN en sus simulaciones. Trabaja en máquinas del tipo RS/6000.

La simulación de moléculas no es simplemente el “dibujo” en 3 dimensiones de un conjunto de átomos, en un orden determinado. Este orden es el resultado de la combinación de datos de difracciones de rayos x, de RMN y cualquier otra información de distancias intermoleculares.

El QUANTA es un sistema de software integrado para la construcción y análisis de estructuras moleculares. Su opción de análisis estructural de proteínas proporciona la capacidad de mostrar representaciones de densidades electrónicas, con interfases interactivas con otros softwares que otorguen datos acerca de minimización de energía de enlace. Trabaja en máquinas del tipo RS/6000.

EL MUNDO DE LAS COMPUTADORAS

Hasta el momento han sido mencionados computadoras de diferentes tipos; hemos hablado de Microcomputadoras, Minicomputadoras, Mainframes, y Supercomputadoras.

Microcomputadoras	- Micromputadoras basados en procesadores de la familia INTEL 80286 80386 80486 - Microcomputadoras basados en procesadores de la familia MOTOROLA. - Microcomputadoras IBM-PS (Personal System)
Minicomputadoras	- AS/400 - RS/6000 - Sistema 36
Mainframes	- IBM 4341,4361,4381 - IBM 3090 - DEC VAX 11/750, 11/785

Supercomputadoras { - Cray Supercomputer (Existen en la actualidad solo 12 computadoras de ese tipo en el Mundo).

Cada uno de estos tipos de computadoras brindan softwares para las diferentes áreas de trabajo, comerciales, científicas, etc. Obviamente, la elección de una de estas máquinas dependerá , básicamente, del volumen de datos a procesar y la complejidad de los mismos.

Microcomputadores

- Manejadores de base de datos (SQL, FOXPRO, Paradox, Informix, DBase IV)
- Lenguajes científicos de programación (C, Pascal, Modula 2)
- Lenguajes para el desarrollo de aplicaciones de inteligencia artificial (PROLOG, LISP, Small Talk)
- Software de comunicaciones (BITCOM, PROCOMM)
- Procesadores de Textos (Microsoft Word, Word Perfect)
- Software para publicaciones (Ventura Publisher, Page Maker)
- Diagramadores de flujo y graficadores (Flow Charting, 3-D Boeing, AUTOCAD, Paint Show, Paint Brush)
- Hojas de cálculo (Lotus Always, Quattro, Works, Symphony, Excel)

Mainframes y Minicomputadoras

- Manejadores de base de datos (SQL)
- Manejadores de documentos (ISIS, STAIRS)
- Lenguajes de programación científicos (C, Pascal, PLI)
- Lenguajes para el desarrollo de Aplicaciones de inteligencia artificial (ESE "Expert System Environment")
- Softwares variados para procesar datos enviados por medio de "interfases" desde instrumentación para espectroscopía RMN, IR, espectrometría de masas, cristalografía de rayos X.
- Softwares para simulación por computadora de sistemas biológicos y procesos dinámicos no-lineales (Fisico-química).
- Softwares para elucidar estructuras moleculares y simulación en 3 dimensiones.
- Softwares para comunicaciones.

LA UNIVERSIDAD

En este último año, la Pontificia Universidad Católica del Perú ha logrado renovar e incrementar su hardware, ubicándola de este modo en un plano preferencial.

El Centro de Cómputo de la Pontificia Universidad Católica (CCPUC) es capaz de brindar el doble de servicios que estuvo brindando anteriormente, adicionalmente a otros proyectos que pretende llevar a cabo, tanto en el plano de investigación, como de comunicaciones.

El CCPUC trabaja en la actualidad con 3 Mainframes (2 IBM 4341, 1 IBM 4361), lo que ha significado un 150% de aumento en su capacidad de procesamiento (la cantidad de terminales distribuidos en el Campus ha aumentado en más del doble).

Se ha adquirido un minicomputador de alta tecnología, de reciente ingreso en el mercado nacional. Es capaz de soportar softwares científicos sofisticados, posee una avanzada técnica en resolución de imágenes gráficas, y está orientado también a la implementación de redes de comunicación. Se trata de la RISC System 6000 (RS/6000).

A todo lo anterior habría que adicionarle una considerable cantidad de microcomputadoras (generalmente con procesadores 286), que ya están ubicadas en toda la universidad y su respectivo Software.

CONCLUSIONES

El químico se encuentra, entonces, en una inmejorable situación para obtener beneficios de esta coyuntura.

Su esfuerzo por integrarse a este mundo debe estar dirigido básicamente a satisfacer sus necesidades de manejo de datos, de almacenamiento de información y comunicaciones. Todos los softwares para manejadores de base de datos, FOXPRO (Microcomputador), SQL (Mainframe), dependiendo del volumen de éstos, le pueden dar una ayuda significativa, a todo científico que trabaje con muchos datos y tenga que manipularlo eficientemente.

Los investigadores que están sumergidos en mares de documentos encontrarían en softwares como ISIS, STAIRS (Mainframe), MicroIsis (Micro-computadores) una herramienta poderosa.

Por otro lado, concebir hoy en día a un científico aislado de los acontecimientos que sacuden el mundo académico, es imposible. El éxito de los grupos de investigación muchas veces se encuentra en la interrelación que han tenido con otros grupos en otras partes del mundo.

Los softwares de comunicación reflejan esta necesidad de comunicación. Los artículos, reportes, espectros, bibliografía, son informaciones que pueden llegar desde cualquier punto remoto a través de estos softwares de comunicación, y sin mayor problema de distancias. Bastará conectarse a las redes públicas de comunicación nacional y extranjera, que extienden sus puntos a los principales centros de investigación mundiales.

Esta es nuestra realidad y aunque parezca mentira no está lejos de lo que se vive en el mundo.

VOCABULARIO

- Software , es el conjunto de programas que permite el funcionamiento de un procesador para el procesamiento de datos y el manejo de periféricos.
- Hardware , aspecto físico de un sistema computarizado. Se refiere a las máquinas y equipos, en general, que forman parte de dicho sistema.
- Mainframe, ("Estructura principal") está, referido a un tipo de computador de gran capacidad de procesamiento.