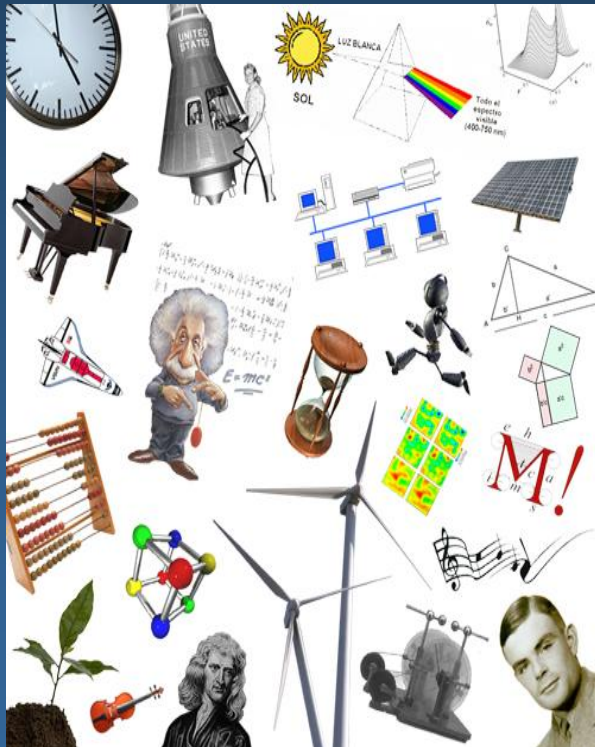


# Física Computacional: Un camino desde el átomo hasta el universo

**IEM**



Vicente Timón

*IEM<sup>1</sup>*

*Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid*

Conferencia

Madrid 6 Noviembre 2015

*Author:*

V. Timón (*IEM-Madrid*)

# Física – Physics - φυσική (ἐπιστήμη)

“Physicos” = Relativo a la naturaleza (realidad) o su estudio

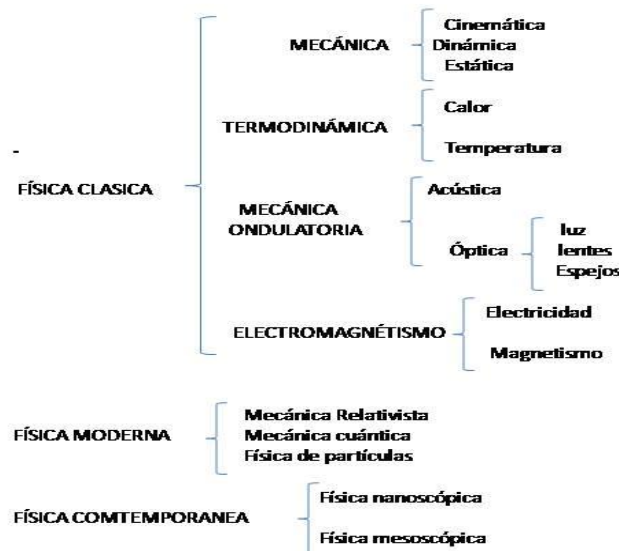
Trata de describir las leyes que la gobiernan mediante una descripción matemática

Ramas:

Desde el estudio de las partículas elementales al cosmos o Universo.

## CLASIFICACIÓN DE LA FÍSICA

La clasificación de la física en ramas, permite agrupar los fenómenos cuyas causas o características sean comunes, permitiendo además que los investigadores se puedan especializar en una de ellas en lo particular.

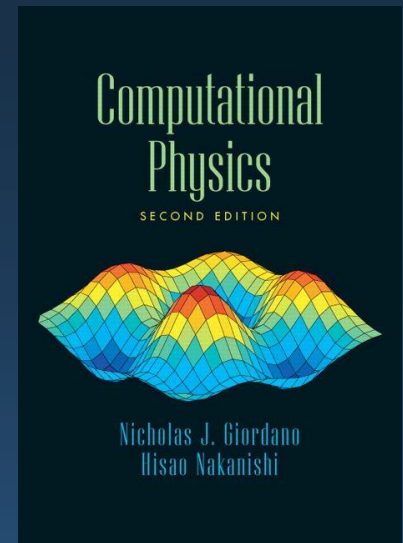


# Física computacional

- \* La Física Nuclear estudia núcleos
- \* La física atómica estudia átomos.
- \* La física del estado sólido estudia sólidos
- \* La astrofísica estudia astros.

.....

- \* La física computacional:  
¿Estudia ordenadores?



La respuesta es **NO** rotundamente **NOOOO**  
¿Que es?

“Computational physics is a synthesis of theoretical analysis, numerical algorithms, and computer programming.”

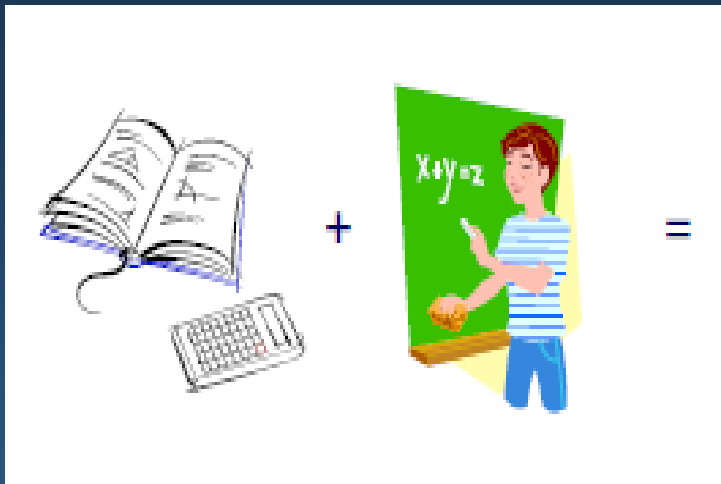
P. L. DeVries Am. J. Phys., vol. 64, 364 (1996)

Traducido al castellano:

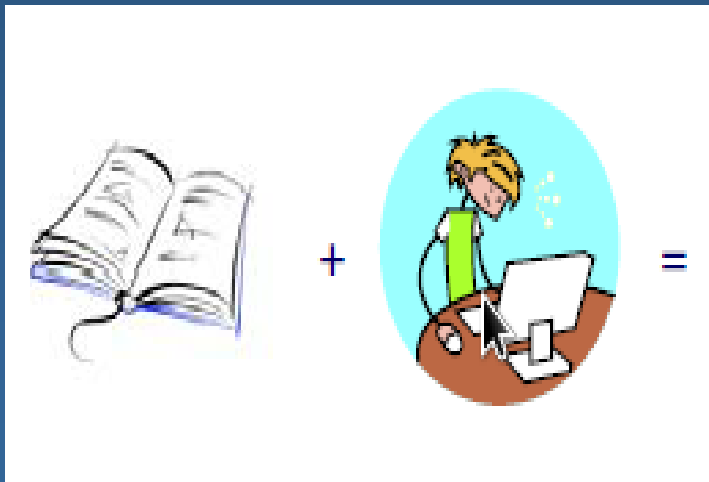
Es una herramienta que mediante el uso de los ordenadores es capaz de resolver problemas complejos en el campo de la física.

## Aclaremos todo esto último un poco mas:

Un esforzado estudiante a la hora de resolver un problema:



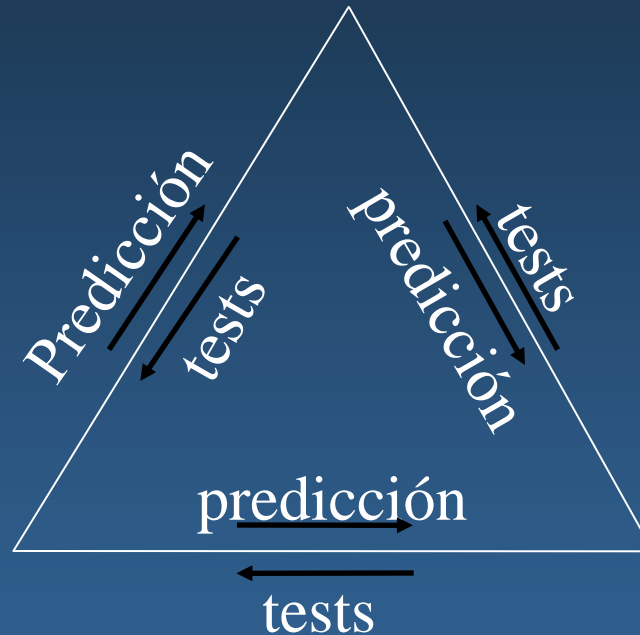
De forma analítica (exacta) solo se pueden resolver problemas sencillos



De forma numérica se pueden resolver problemas complejos y manejar gran cantidad de datos.

# Teoría - Computación - Experimento

## Física computacional



Representa  
“experimentos”  
ideales o reales en el  
ordenador resuelve  
modelos físicos  
numericamente

## Física Teórica

Construcción matemática  
de modelos e hipótesis  
que describen la  
naturaleza.

## Física experimental

Medida cuantitativa  
de un fenómeno  
físico

# La motivación de realizar experimentos computacionales

## Medida y Experimento:

- Muestra
- Instrumento
- Calibración
- Medición



## Experimento computacional<sup>1</sup>

- Modelo
- Programa
- Prueba del programa
- Cálculos
- Resultados (análisis datos)



## Ventajas:

- Mas baratos que los experimentos.
- Uso en condiciones extremas.
- Son predictivos.
- No interacción con aparato medida.

## Inconvenientes:

- Tamaño del sistema.
- Modelo
- Tiempo.
- Aproximaciones teoría.

[1] William J. Kaufmann y Larry L. Smarr, Supercomputing and the Transformation of Science, Scientific American Library, New York, 1993.

Escalas

Escalas



longitud de Planck ( $\ell_P$ ) u hodón, geom clásica, gravedad cuántica

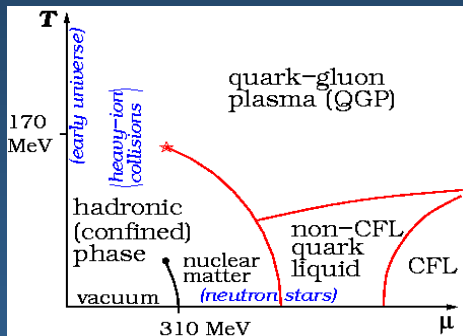
# La cromodinámica cuántica

Física de: Quarks y gluones

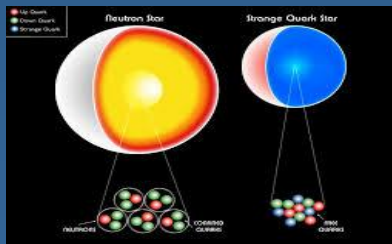
Escalas de el orden de  $10^{-15}m$

Ecuaciones vienen teoría de campos relativistas

Fases de los quarks de materia



Quark-gluon plasma instability (with graphs)



3+1 dimensional simulations of non-Abelian plasma instabilities in gauge-covariant Boltzmann-Vlasov equations for the QCD gauge group SU(3) as well as for SU(4) and SU(5). Vicente Timón, IEM-CSIC - Madrid

## What is QCD (Quantum Chromo Dynamics)?

Elementary fields:

Quarks

Gluons

$$(q_\alpha)_f \begin{cases} \text{color} & a = 1, \dots, 3 \\ \text{spin} & \alpha = 1, 2 \\ \text{flavor} & f = u, d, s, c, b, t \end{cases}$$

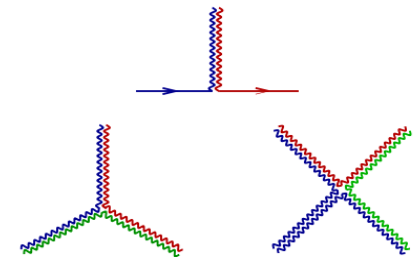
$$A_\mu^a \begin{cases} \text{color} & a = 1, \dots, 8 \\ \text{spin} & \epsilon_\mu^\pm \end{cases}$$

Dynamics: Generalized Maxwell (Yang-Mills) + Dirac theory

$$\mathcal{L} = \bar{q}_f (i\mathcal{D} - m_f) q_f - \frac{1}{4} G_{\mu\nu}^a G_{\mu\nu}^a$$

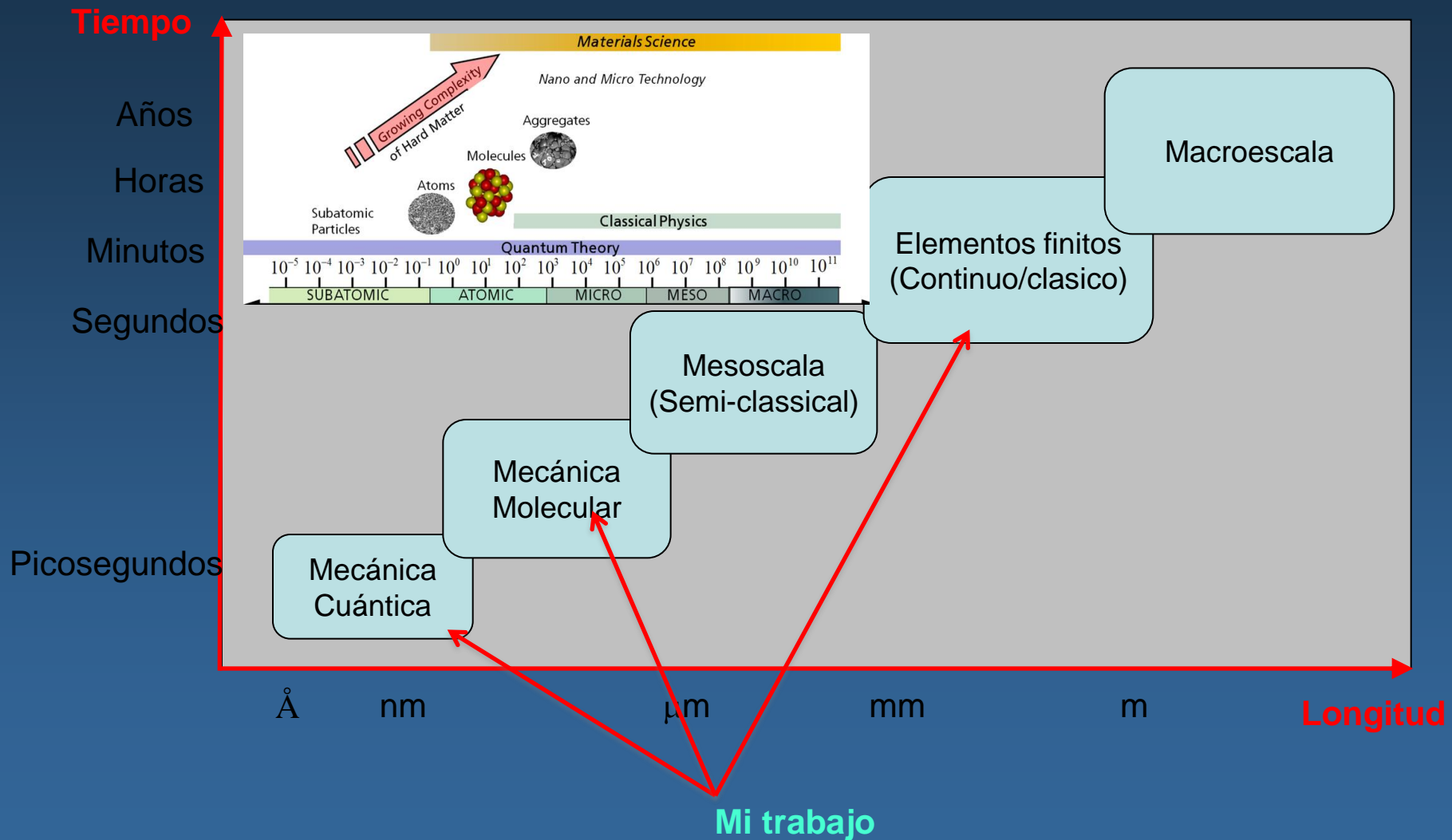
$$G_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c$$

$$i\mathcal{D}q = \gamma^\mu (i\partial_\mu + g A_\mu^a t^a) q$$





# Escala atómica a real



# Física Cuántica

## La ecuación de Schrodinger

Si se logra resolver la ecuación para un sistema entonces conoceremos todo acerca del mismo:

$$\vec{p} \Leftrightarrow -i\hbar\vec{\nabla} \quad \text{or} \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \nabla^2 \Rightarrow$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t) \Psi = \frac{i\hbar \partial \Psi}{\partial t}$$

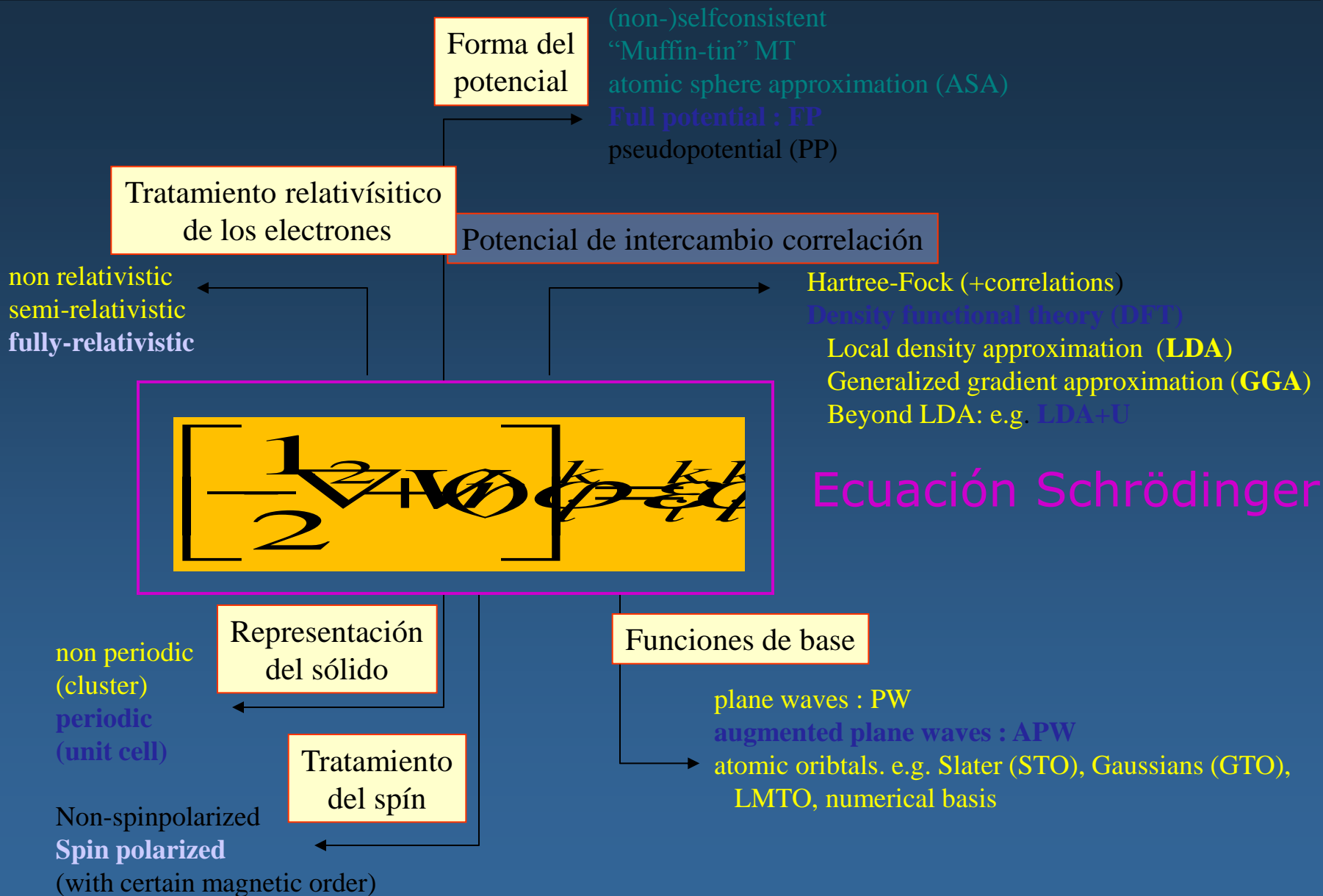
$\Psi$  es la función de onda, donde esta el contenido de toda la información del sistema mecánico-cuántico



**Schrödinger**

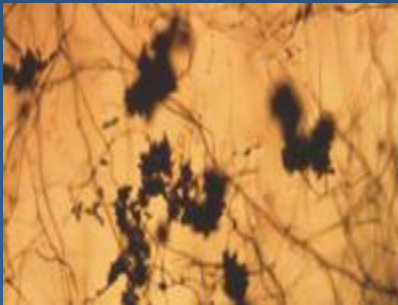
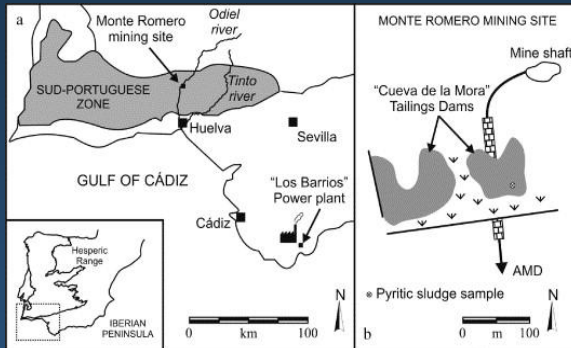
Vicente Tirón, IEM-CSIC - Madrid

# Conceptos para resolver la ecuación de Schrodinger en sólidos periódicos



# Hongo acidofílico: (Hongo negro) no Schwertmannita

Mina de Monte Romero (Huelva)  
pH = 2 [1]

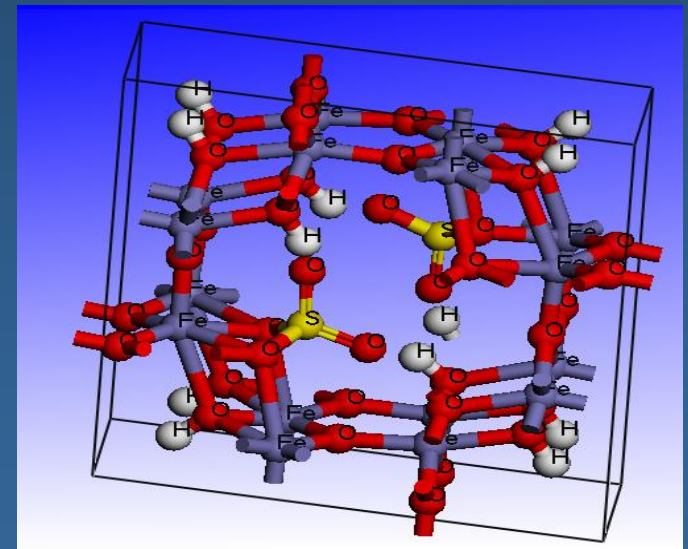
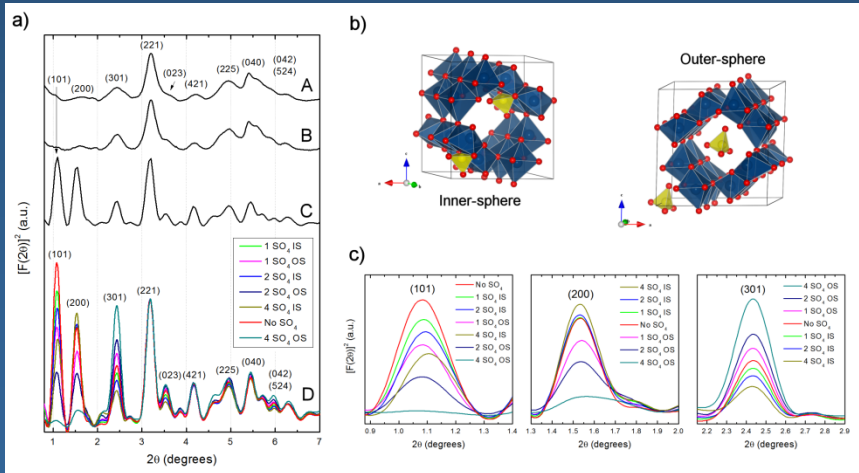
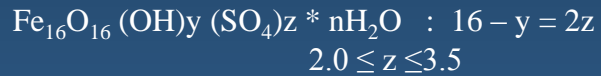


[1] Rafael Pérez-López, José Miguel Nieto and Gabriel Ruiz de Almodóvar Utilization of fly ash to improve the quality of the acid mine drainage generated by oxidation of a sulphide-rich mining waste: Column experiments. *Chemosphere*, 67, 2007, 1637-1646

# Resultados: Estructura de la Schwertmannita

Trabajo del IACT

La Schwertmannita [1]



[1] Alejandro Fernandez-Martinez, Vicente Timon, Gabriela Roman-Ross, Gabriel J. Cuello, John E. Daniels, Carlos Ayora, The structure of schwertmannite, a nanocrystalline iron oxyhydroxysulfate, American Mineralogist, Aug 1, 2010; 95 (809)

Vicente Timón, IEM-CSIC - Madrid

# Dinámica Molecular

## Idea básica

- Molecular dynamics simulates the motions of atoms according to the forces between them.
- Solve Newton's equations of motion

$$m_j \frac{d^2 \mathbf{r}_j}{dt^2} = \mathbf{F}_j, \quad \mathbf{F}_j = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_j}, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

- Choose a "force field" (specified by a potential  $V$ ) appropriate for the given system under study.

$$\mathbf{F}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\nabla U(r_{ij})$$

Interatomic Potential  
– the only  
approximation. Force  
it is gradient of  
potential

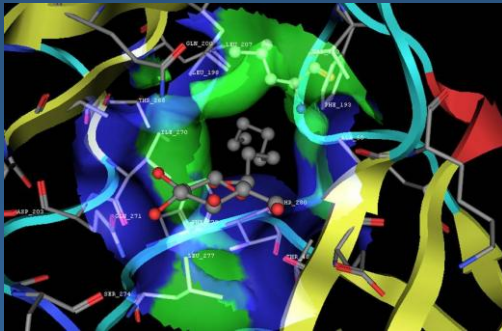
- Decide a statistical ensemble to use, choice of boundary conditions; collect statistics of observables

# Ejemplos de simulaciones de Dinámica Molecular

## Fusión del hielo



## Droga entrando en una proteína



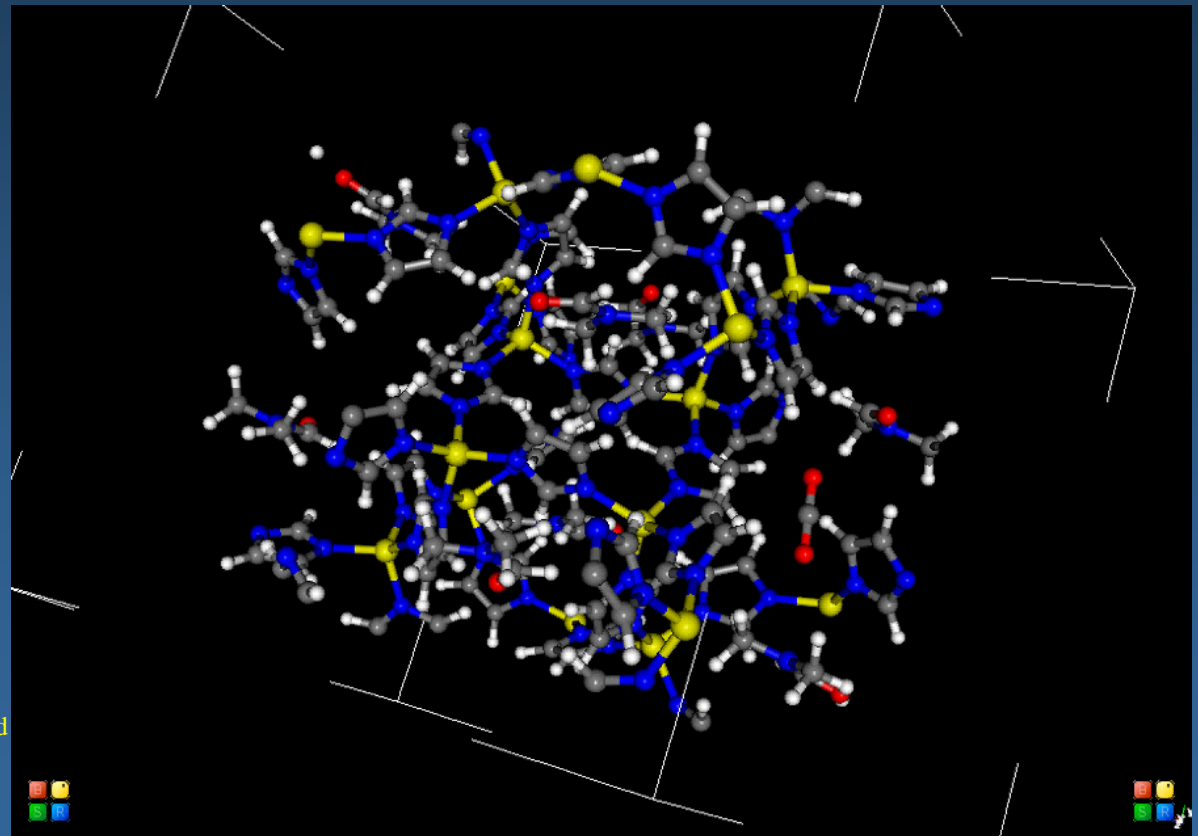
Decherchi, S., et al. (2015). "The ligand binding mechanism to purine nucleoside phosphorylase elucidated via molecular dynamics and machine learning." Nat Commun 6.

(MD) study the binding mechanism of a transition state analogue (DADMe-immucillin-H) to the purine nucleoside phosphorylase (PNP) enzyme.

Vicente Tirón, IEM-CSIC - Madrid

Autor (CAPZEO)[1]

Zinc-Zeolitic Imidazole CO<sub>2</sub> adsorption Ab initio Born-Oppenheimer Molecular Dynamics NPT (273K, 0.0001GPa) MD-ZIF4 + 1CO<sub>2</sub> Movie



[1] V. Timon, MLSenen, Majdi (Unpublished CAPZEO work).

# Algo mas divertido: El tiempo y el Océano

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{L}u - fv = -\frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p}{\partial x} + \mathcal{D}_m u + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_m \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (\text{A1})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \mathcal{L}v + fu = -\frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p}{\partial y} + \mathcal{D}_m v + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_m \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (\text{A2})$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \quad (\text{A3})$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (\text{A4})$$

$$\rho = \rho(T, S, p) \quad (\text{A5})$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathcal{L}T = \mathcal{D}_h T + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_h \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (\text{A6})$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \mathcal{L}S = \mathcal{D}_h S + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_h \frac{\partial S}{\partial z} \right), \quad (\text{A7})$$

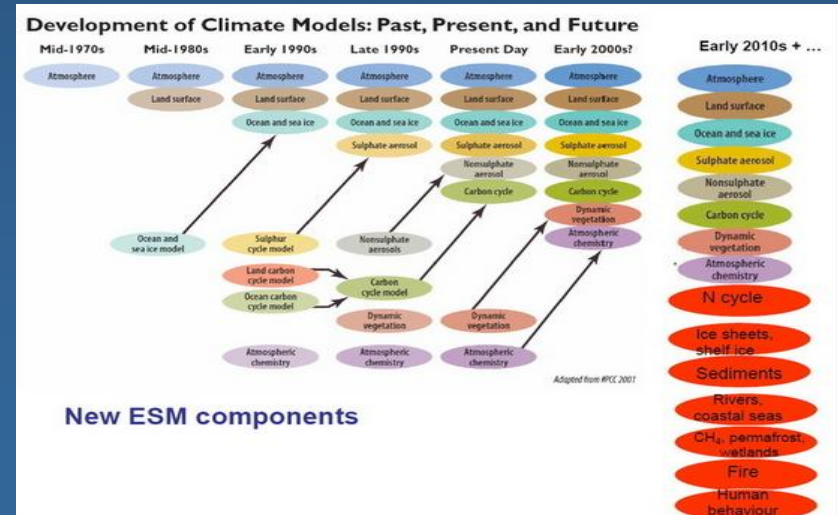
The work of Lorenz (1963, 1965, 1968) demonstrated that the atmosphere is a chaotic system, in which small differences in the initialization...well within observational error... can have large impacts on the forecasts, particularly for longer forecasts

Vicente Tirión, IEM-CSIC - Madrid

## PARÁMETROS

- 3 ecuaciones de movimiento: Segunda ley de Newton.
- Primera ley de la termodinámica.
- Conservación de la masa.
- Ley de los gases perfectos.
- Conservación del agua

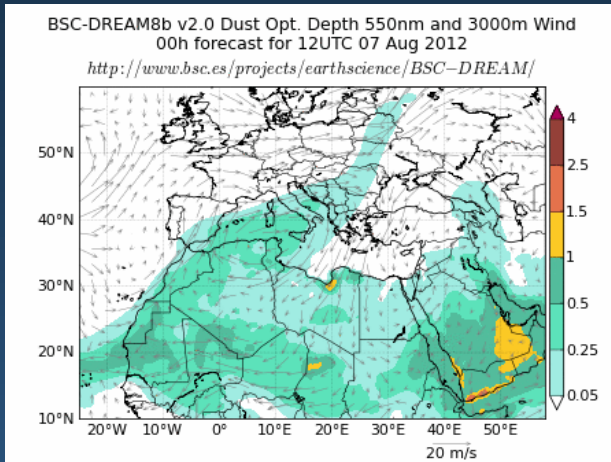
Con suficientes datos para la inicialización del sistema y un medio para integrar esas ecuaciones la predicción numérica del tiempo la dinámica de los océanos es posible.





# Modelización del clima y el oceano en BSC

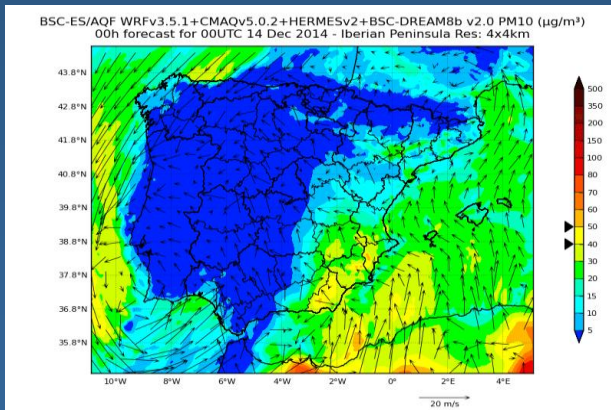
## Polvo mineral



## Océano\*\*



## Calidad del aire\*



\*\*<http://www.nemo-ocean.eu/>  
\*\*<http://noc.ac.uk/news/met-office-and-noc-enhance-ocean-observatory>

\*<http://www.bsc.es/caliope/es>

Vicente Tirón, IEM-CSIC - Madrid

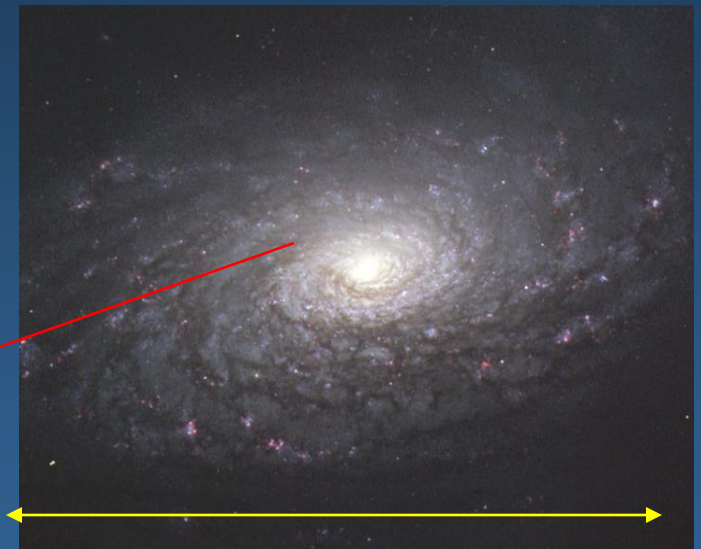
# Astrofísica\*:

The universe is the ultimate high energy physics experiment.

Los sistemas dinámicos que evolucionan con el tiempo, como las galaxias, tienen tres coordenadas de posición (ya que son objetos en 3D) y también tres coordenadas de velocidad (ya que pueden moverse en las tres direcciones del espacio).

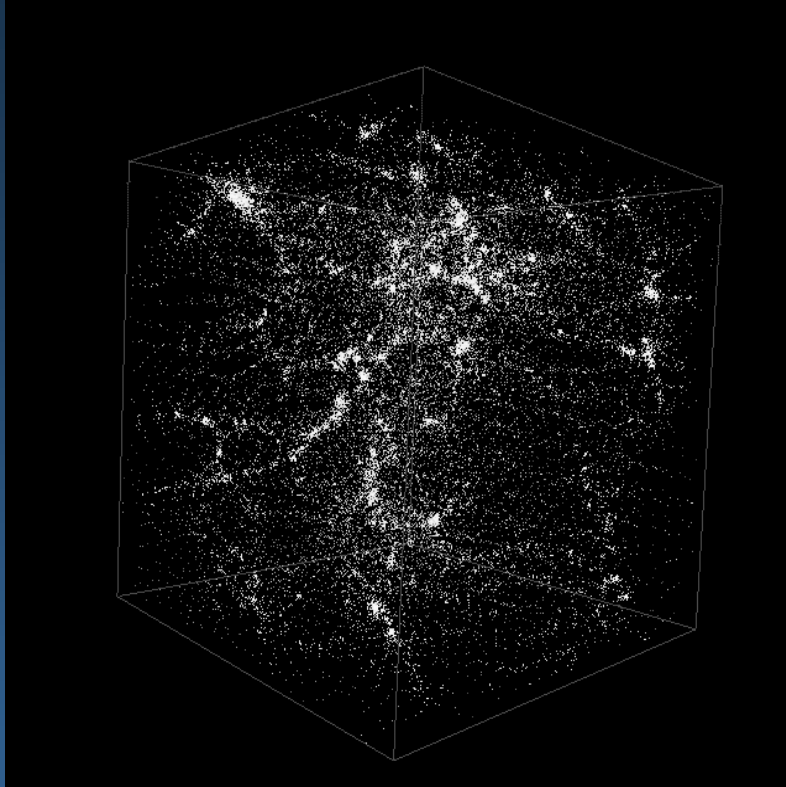
Sin embargo nosotros solo podemos observar dos coordenadas de posición y la velocidad de la línea de visión

  
observador



Sistema consiste en estudiar muchos cuerpos (planetas, estrellas, galaxias, ...) con masa posición y velocidad interactuando por medio de la gravedad (Ley de Newton gravitación universal). Problema de los **N-Cuerpos**

# Ejemplos: Evolución del Cosmos



Vogelsberger, M., et al. (2014). "Properties of galaxies reproduced by a hydrodynamic simulation." *Nature* **509(7499): 177-182.**

Previous simulations of the growth of cosmic structures have broadly reproduced the "cosmic web" of galaxies that we see in the Universe, but failed to create a mixed population of elliptical and spiral galaxies, because of numerical inaccuracies and incomplete physical models. Moreover, they were unable to track the small-scale evolution of gas and stars to the present epoch within a representative portion of the Universe. Here we report a simulation that starts 12 million years after the Big Bang, and traces 13 billion years of cosmic evolution with 12 billion resolution elements in a cube of 106.5 megaparsecs a side. It yields a reasonable population of ellipticals and spirals, reproduces the observed distribution of galaxies in clusters and characteristics of hydrogen on large scales, and at the same time matches the "metal" and hydrogen content of galaxies on small scales.

Parsec = 3262 años luz

<https://www.youtube.com/watch?v=SY0bKE10ZDM>

# Ejemplos: White Dwarf Deflagration, Burning Front

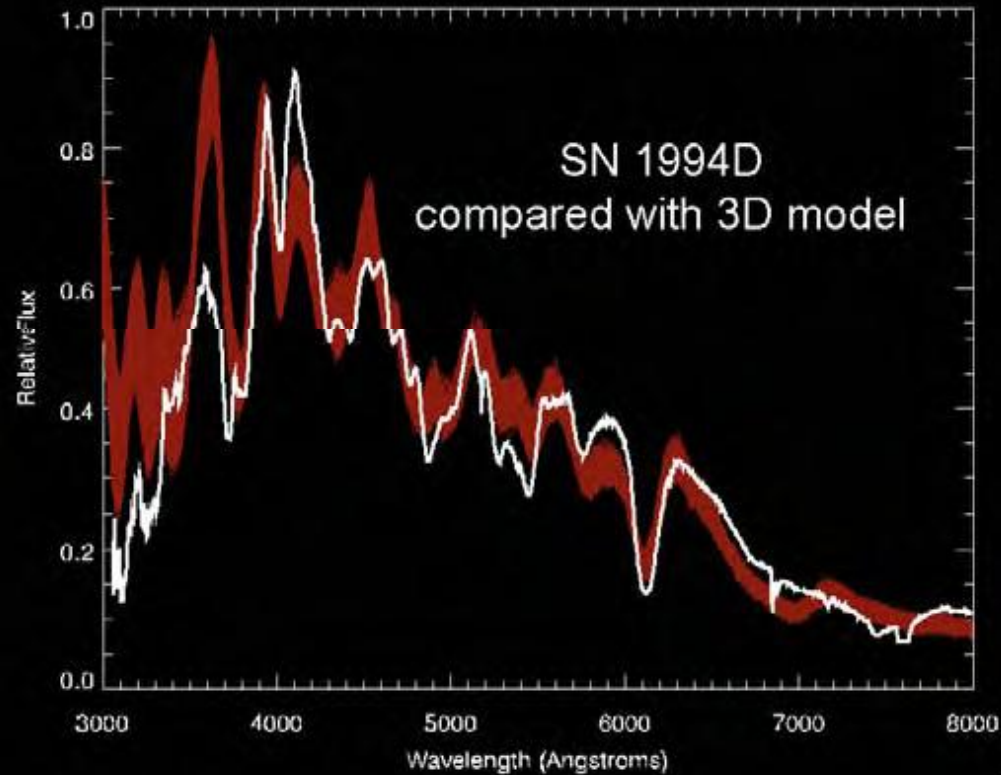
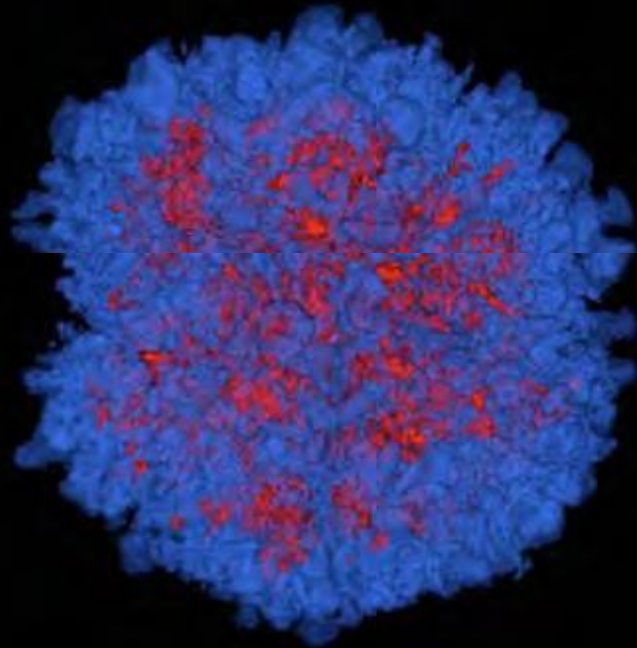
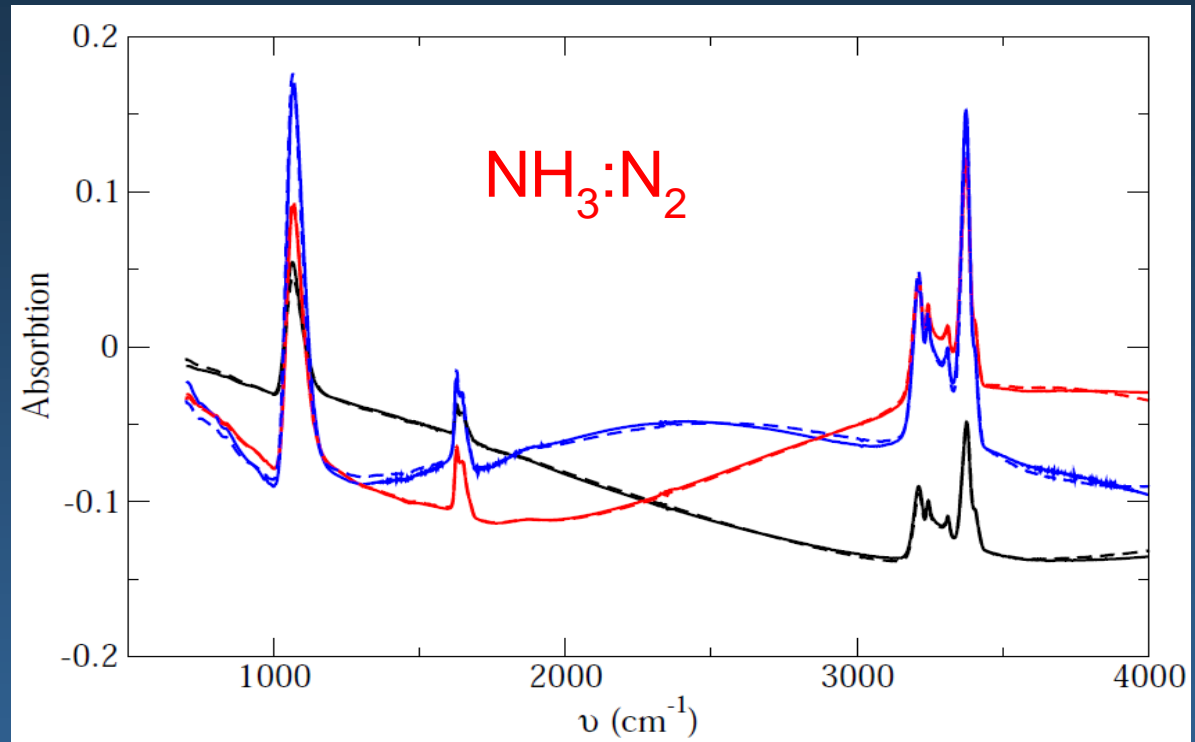


Figure 2. Left: Three-dimensional simulation of a carbon thermonuclear deflagration supernova (Type Ia). Right: Overlay of the simulated optical spectrum with an observed supernova of the sort used for cosmic acceleration measurements. The simulated spectrum required a three-dimensional solution of the radiative transfer equation coupled to a large ionization network (Kasen et al. 2008). Image courtesy of Stan Woosley (University of California, Santa Cruz).

# Astrofísica:

## Nosotros: Hielos y Plasmas\*

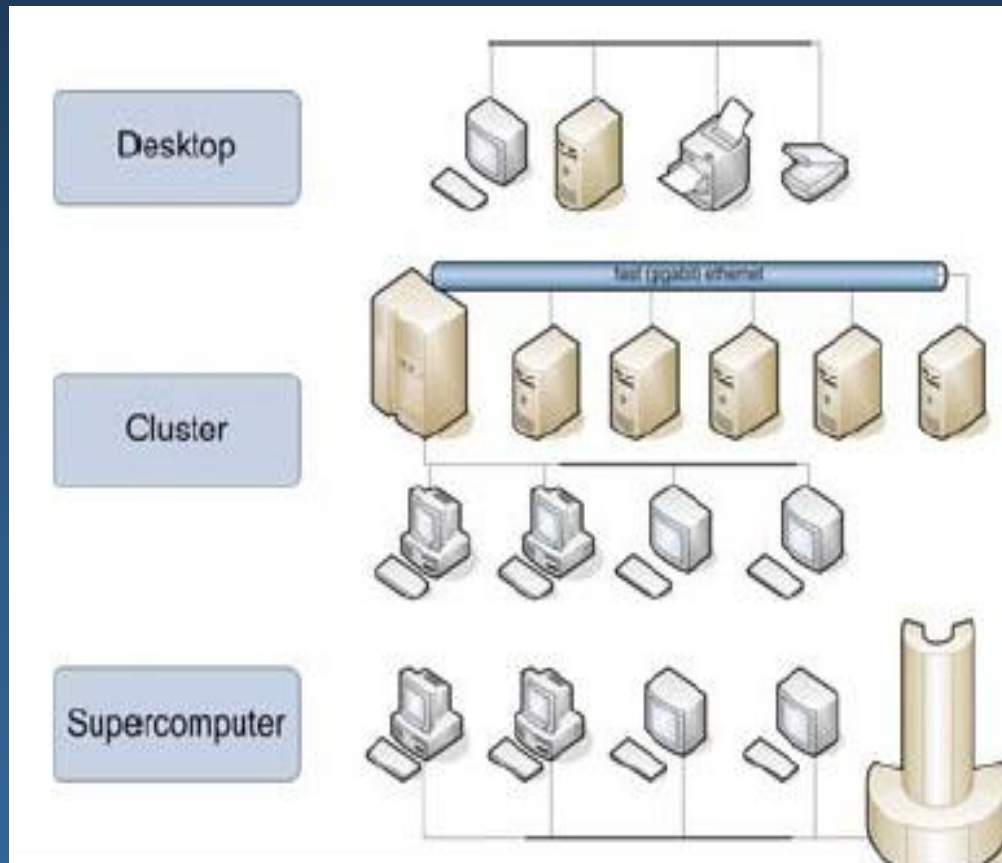


Experimental spectra (continuous) and calculated with the  $n$ ,  $k$  set (dashed)

## MIR Optical constants of $\text{NH}_3:\text{N}_2$ ice at 15 K

\*Zanchet, A., Y. Rodríguez-Lazcano, Ó. Gálvez, V. J. Herrero, R. Escribano and B. Maté (2013).  
"Optical constants of  $\text{NH}_3$  and  $\text{NH}_3:\text{N}_2$  amorphous ices in the near-infrared and mid-infrared regions."  
[Astrophysical Journal 777\(1\)](#).

Donde se llevan a cabo este tipo de cálculos o modelizaciones



Ordenador personal

Cluster de ordenadores

Superordenador

# Códigos, ordenadores, compilación,.....

## Mecánica cuántica:

QM-HF/DFT (No periódicos)- **Gaussian**, **Gamess**, NewChem, Turbomole,...

QM-HF (Periódicos)- Crystal

QM-DFT (Periódicos)- SIESTA, **VASP**, **WIEN**, **CASTEP**,...

## Dinámica molecular:

MM: Gulp, **DL\_POLY**, QM: **CPMD**, **CASTEP-MD**, **SIESTA-MD**,...

## Visualización:

**Materials Studio**, GDIS, Molekel, .....

## Océano

NEMO (<http://www.nemo-ocean.eu/>)

## Clima

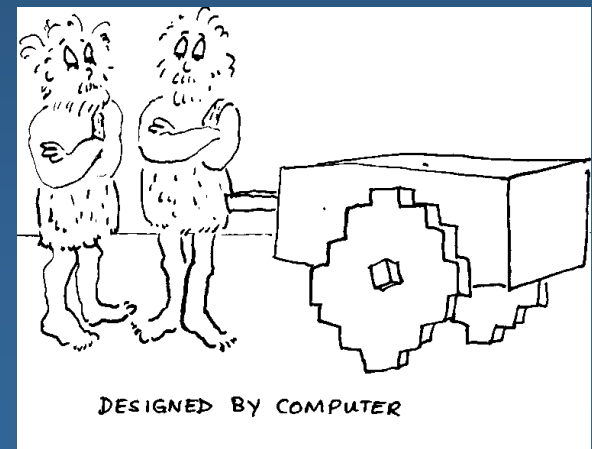
WRF Weather Research & Forecasting Model, <http://www.wrf-model.org/index.php> Para móviles

[https://play.google.com/store/apps/details?id=appinventor.ai\\_Sibboid13.GFS\\_Mittel\\_Europa](https://play.google.com/store/apps/details?id=appinventor.ai_Sibboid13.GFS_Mittel_Europa)

- Fortran 90-95: (Unas líneas hasta 100000)
- Arquitecturas 64 bits (Entornos UNIX)
- Librerías matemáticas: Blas, Lapack,
- MPI. Open MPI
- Cloud ??

Todos estos métodos dan los mismos resultados cuando se hacen bien los cálculos

\*Códigos de pago (licencia).



# Donde se simula?:



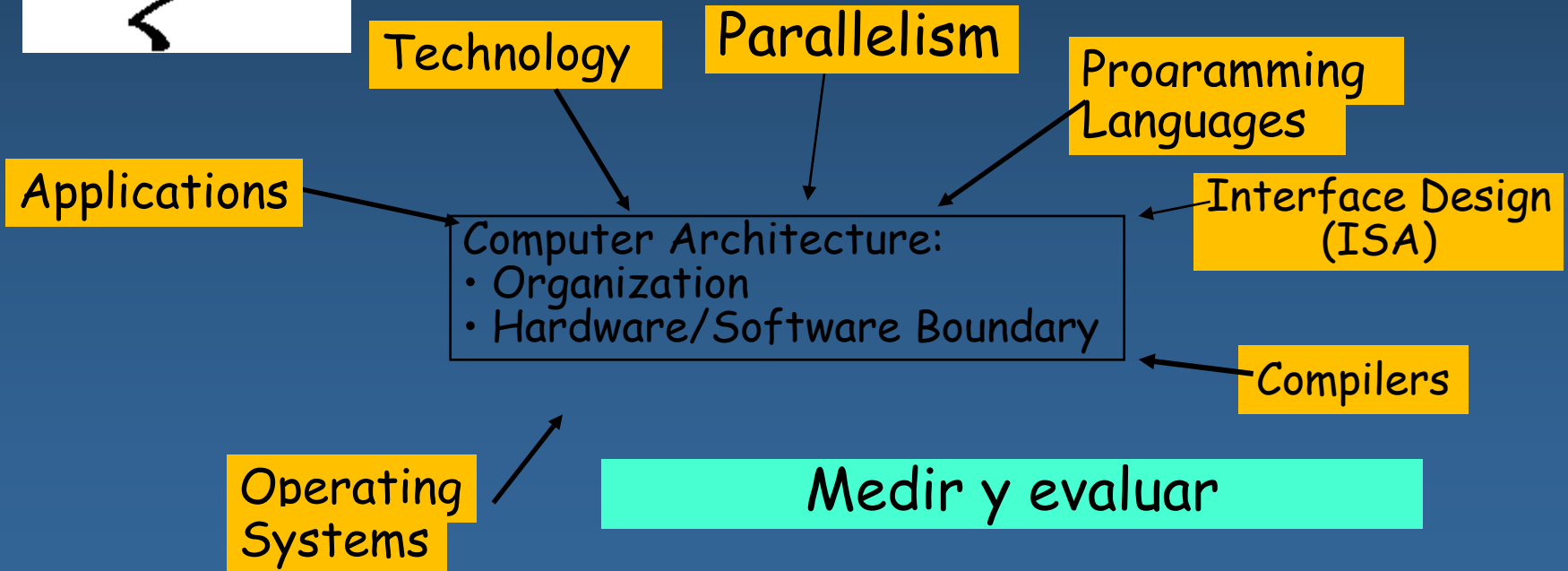
Centro	Infraestructura	Potencia pico
<b>Centro Nacional de Supercomputación</b> Barcelona	<i>Mare Nostrum</i> : IBM cluster PowerPCs	42 Tflop/sg
<b>BIFI</b> : Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos Zaragoza	Cluster Intel Xeons y PIV	2.3 Tflop/sg
<b>IFCA</b> : Instituto de Física de Cantabria Santander	Cluster de Intel Xeons y Power PCs	1.7 Tflop/sg
<b>CESGA</b> : Centro de Supercomputación de Galicia Santiago de Compostela	Máquinas de HP y clusters de procesadores Intel	1.3 Tflop/sg



Mare nostrum



# Prepararse para ejecutar una simulación en física computacional (De lunáticos)



Una vez demostrado que todo esto sirve para algo. ¿Que sucede actualmente?:

- Recortes,
- Envejecimiento de infraestructuras,
- Presupuestos,
- Personal,



Supercomputación:

Mare Nostrum Año 2004  
Actualmente puesto 52

<http://www.top500.org/lists/2014/11/>

TOP 10 Sites for November 2014

For more information about the sites and systems in the list, click on the links or view the complete list.

RANK	SITE	SYSTEM	CORES	RMAX (TFLOP/S)	RPEAK (TFLOP/S)	POWER (KW)
1	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 3151P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini Interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	Riken Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu Interconnect Panitsu	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
6	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2680 8C 2.600GHz, Aries Interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	7,788.9	2,325
7	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462,462	5,168.1	6,520.1	4,510
8	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	458,752	5,008.9	5,872.0	2,301
9	DOE/NNSA/LLNL United States	Vulcan - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393,216	4,293.3	5,033.2	1,972
10	Government United States	Cray CS-Storm, Intel Xeon E5-2660v2 10C 2.2GHz, Infiniband FDR, Nvidia K40 Cray Inc.	72,800	3,377.0	6,131.8	1,499

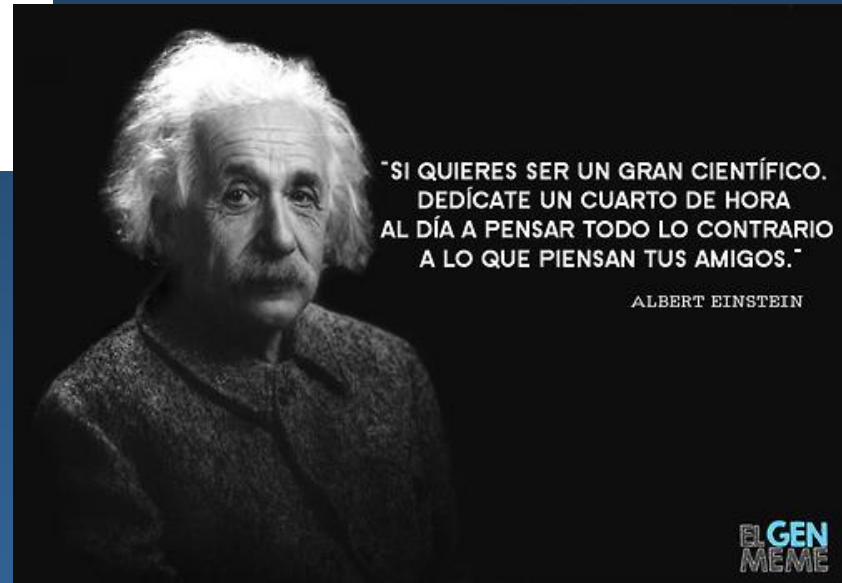
# Os animo a ser científicos/as



- Te gusta el conocimiento
- Eres inquieto
- Te gusta saber mas pero entender menos

.....

Todo esto sin salirse por supuesto del método científico

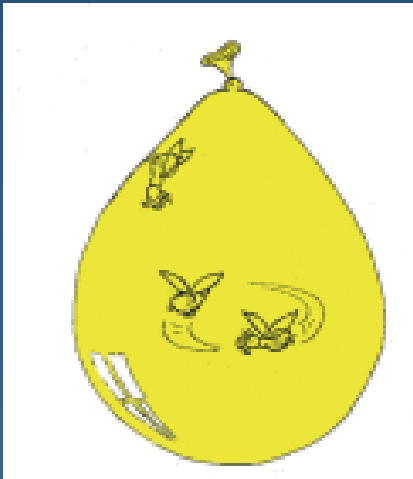


Luego llévate la contraria a ti mismo y échale la culpa a la naturaleza  
Seguro que algo descubres...

# Esta claro:

Con "ordenadores" y "buenos investigadores" hay un gran futuro en la Física computacional.

## Gracias por vuestra asistencia.



**Alguna pregunta**



