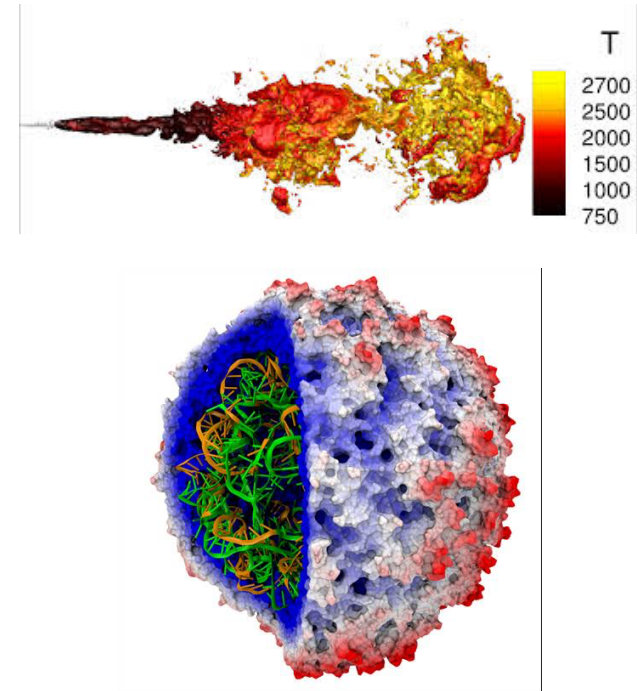
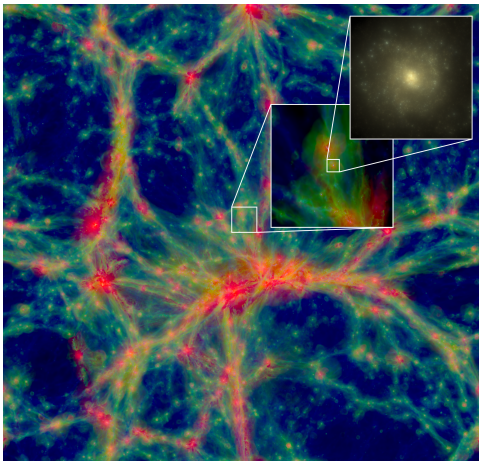


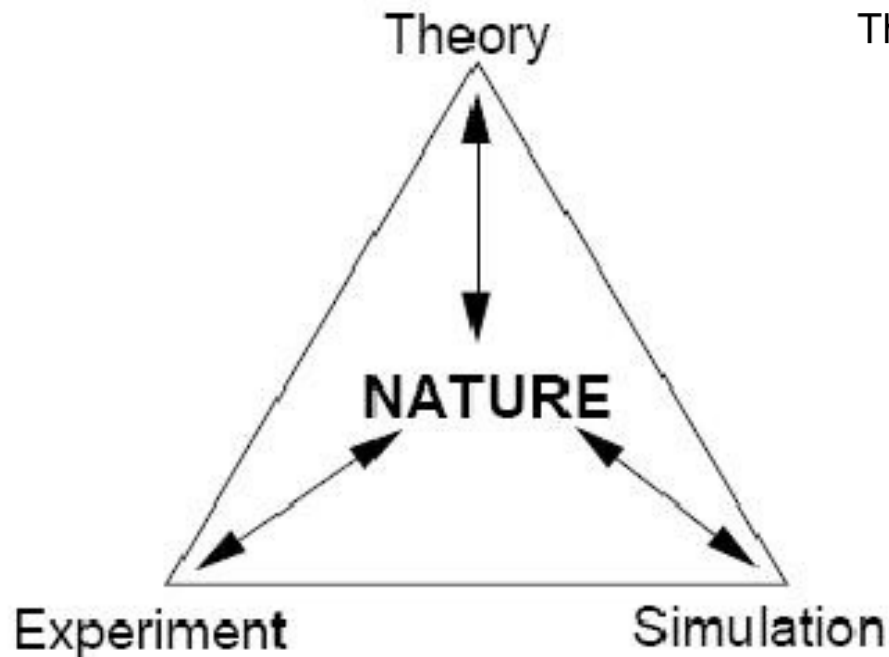
# Ordenadores en Física

## Cómo y para qué

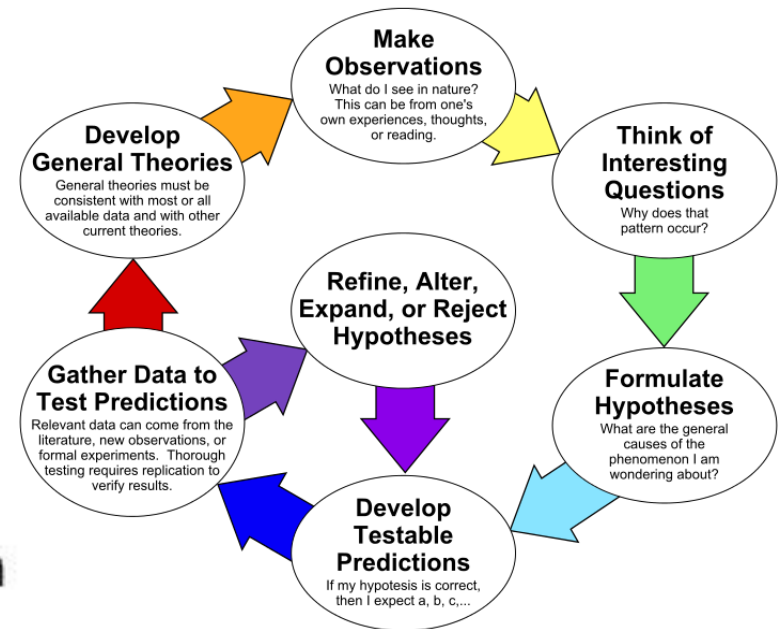


# Simulación por ordenador

- **Antigüedad:** Filosofía Natural (Teoría)
- **Renacimiento:** Método científico (Experimentación)
- **Siglo XX:** Simulación para entender la naturaleza.

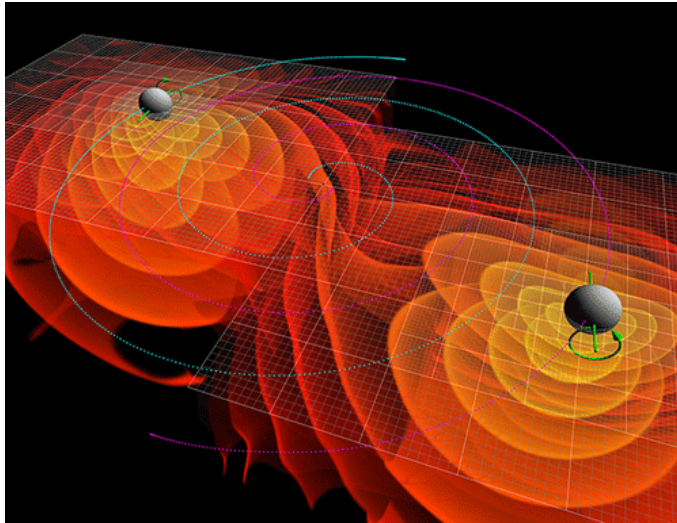


## The Scientific Method as an Ongoing Process



En algunos casos, la simulación  
hace el papel de la teoría ...

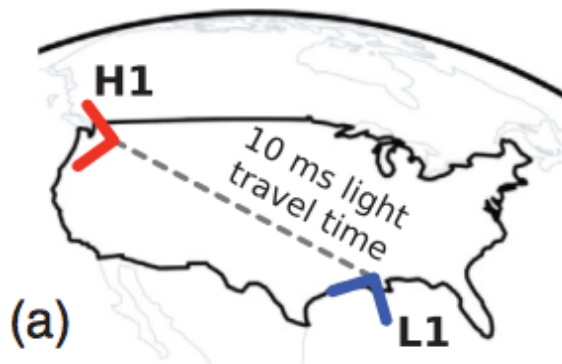
# Ondas gravitacionales



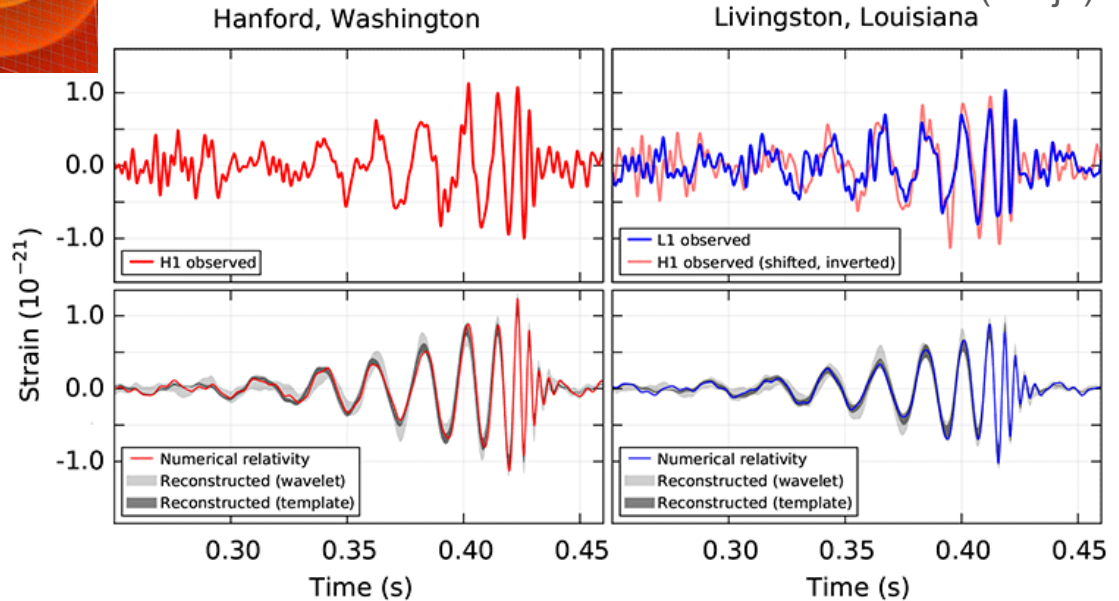
Simulación numérica de las ondas gravitacionales emitidas en el colapso espiral de dos agujeros negros



Señal medida (arriba) y predicción para la colisión de dos agujeros negros, basada en relatividad numérica (abajo)

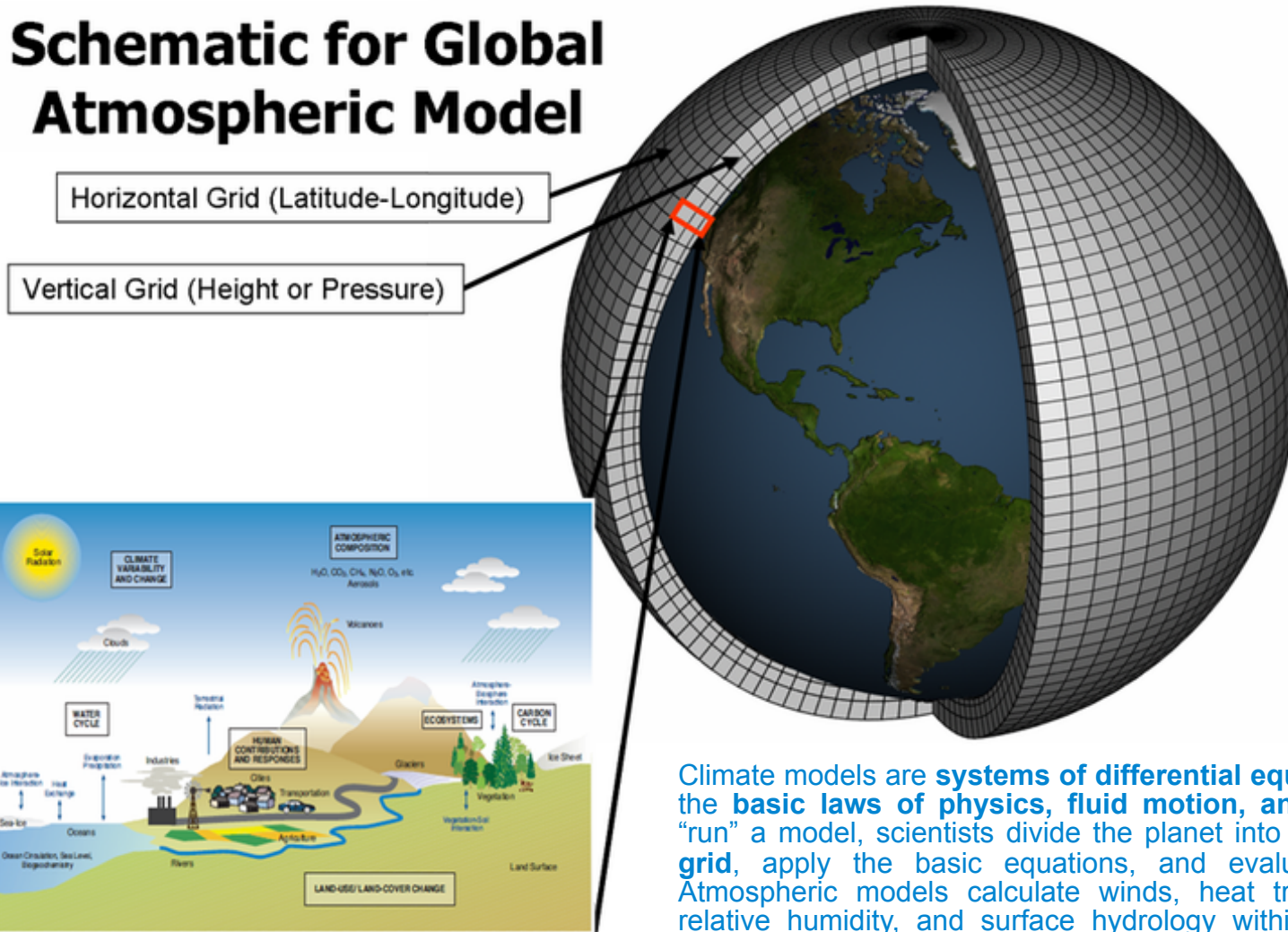


(a)



# Predicción del clima

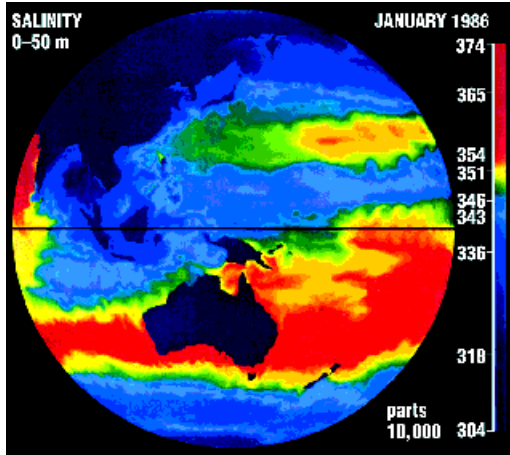
## Schematic for Global Atmospheric Model



Climate models are **systems of differential equations** based on the **basic laws of physics, fluid motion, and chemistry**. To “run” a model, scientists divide the planet into a **3-dimensional grid**, apply the basic equations, and evaluate the results. Atmospheric models calculate winds, heat transfer, radiation, relative humidity, and surface hydrology within each grid and evaluate **interactions with neighboring points**.

# Predicción del clima

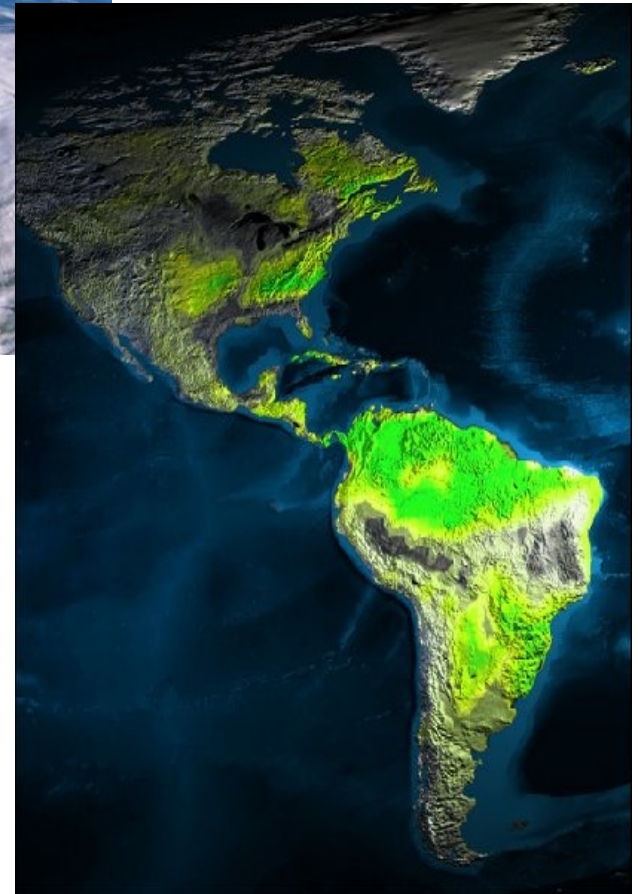
## Fenómenos: el niño



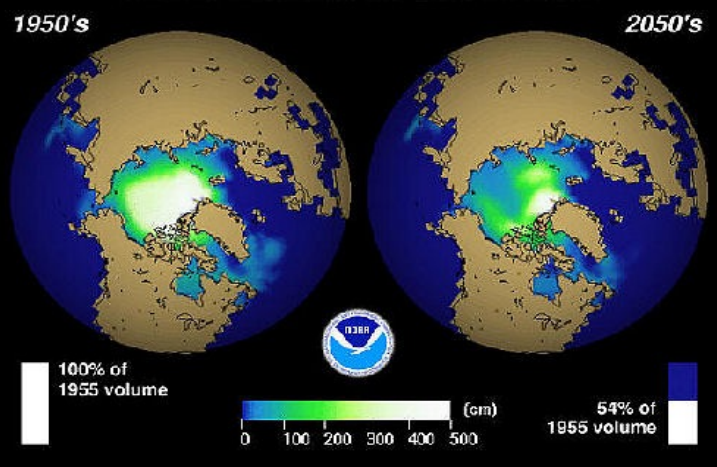
## Huracanes



## Lluvias



## Sea Ice Thickness (10-year average)



Agujero de la capa de ozono y evolución de la capa de hielo de los polos

mean

mean - min

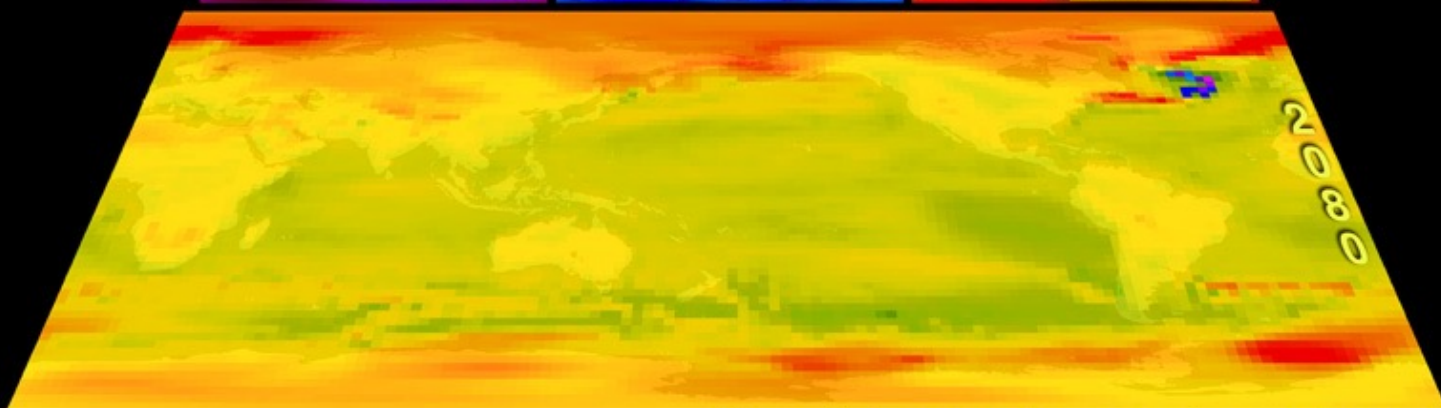
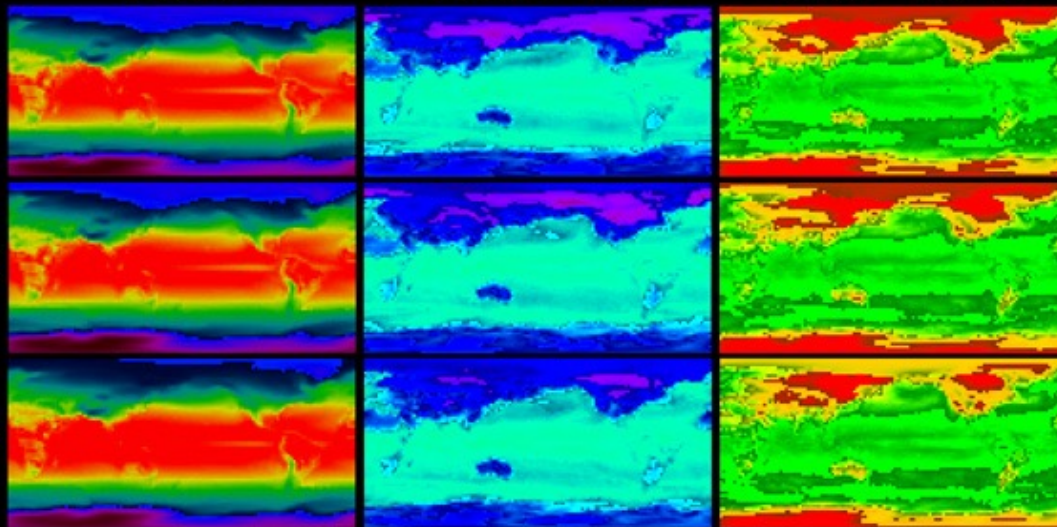
max - mean

Decadal climate variations are important indicators of long-term climatological factors. Comparisons of decadal averages clearly show polar warming trends, especially in the north.

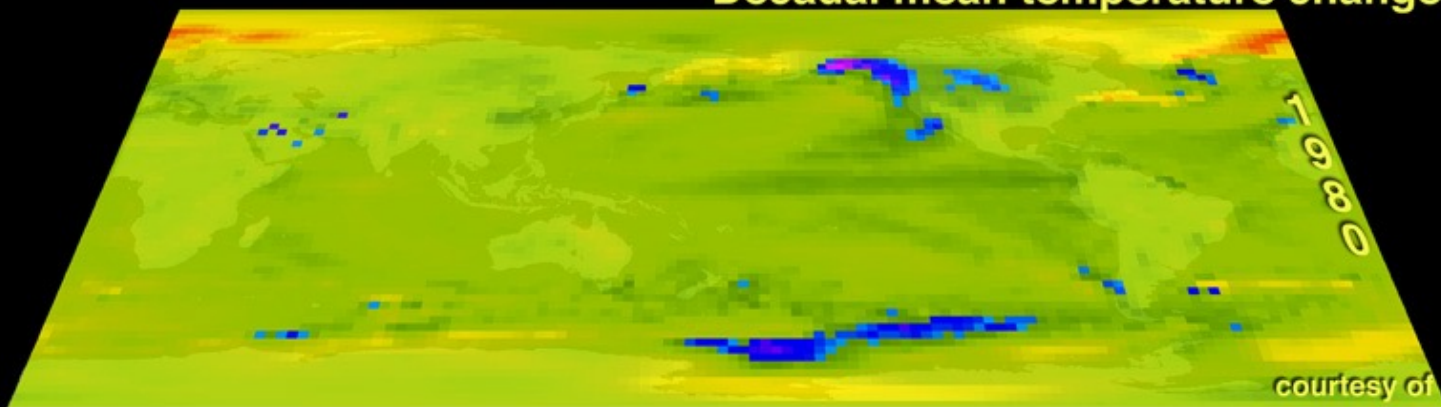
1880-1890

1980-1990

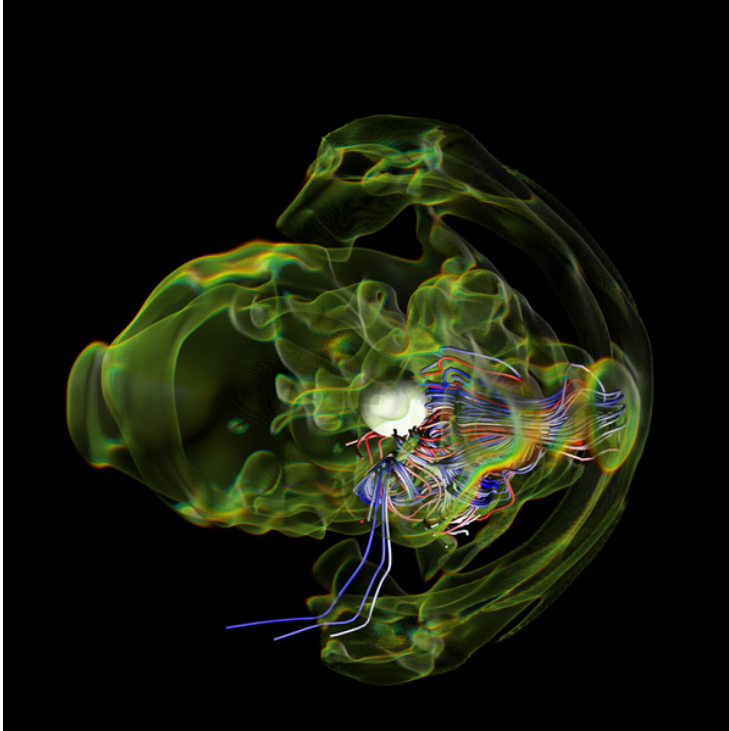
2080-2090



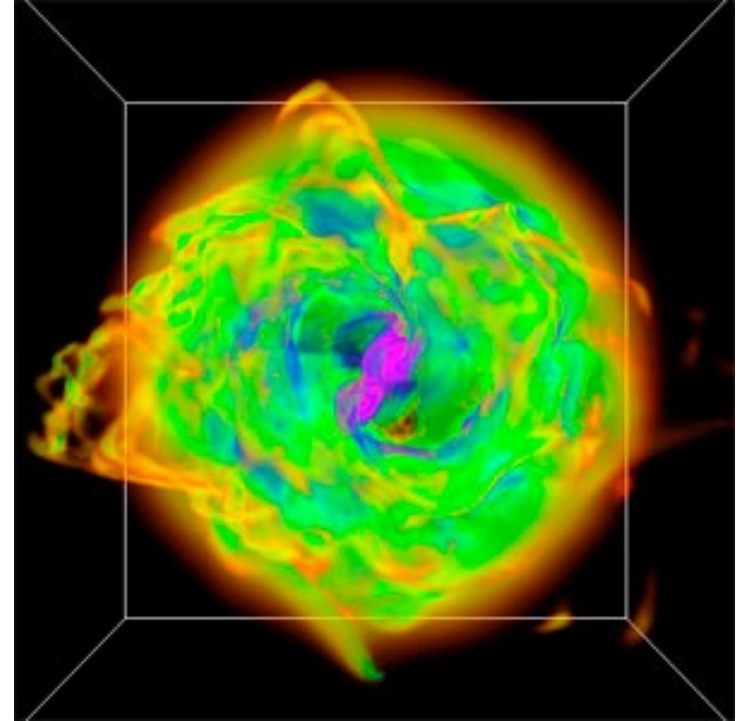
Decadal mean temperature change from 1880



# Formación y evolución estelar



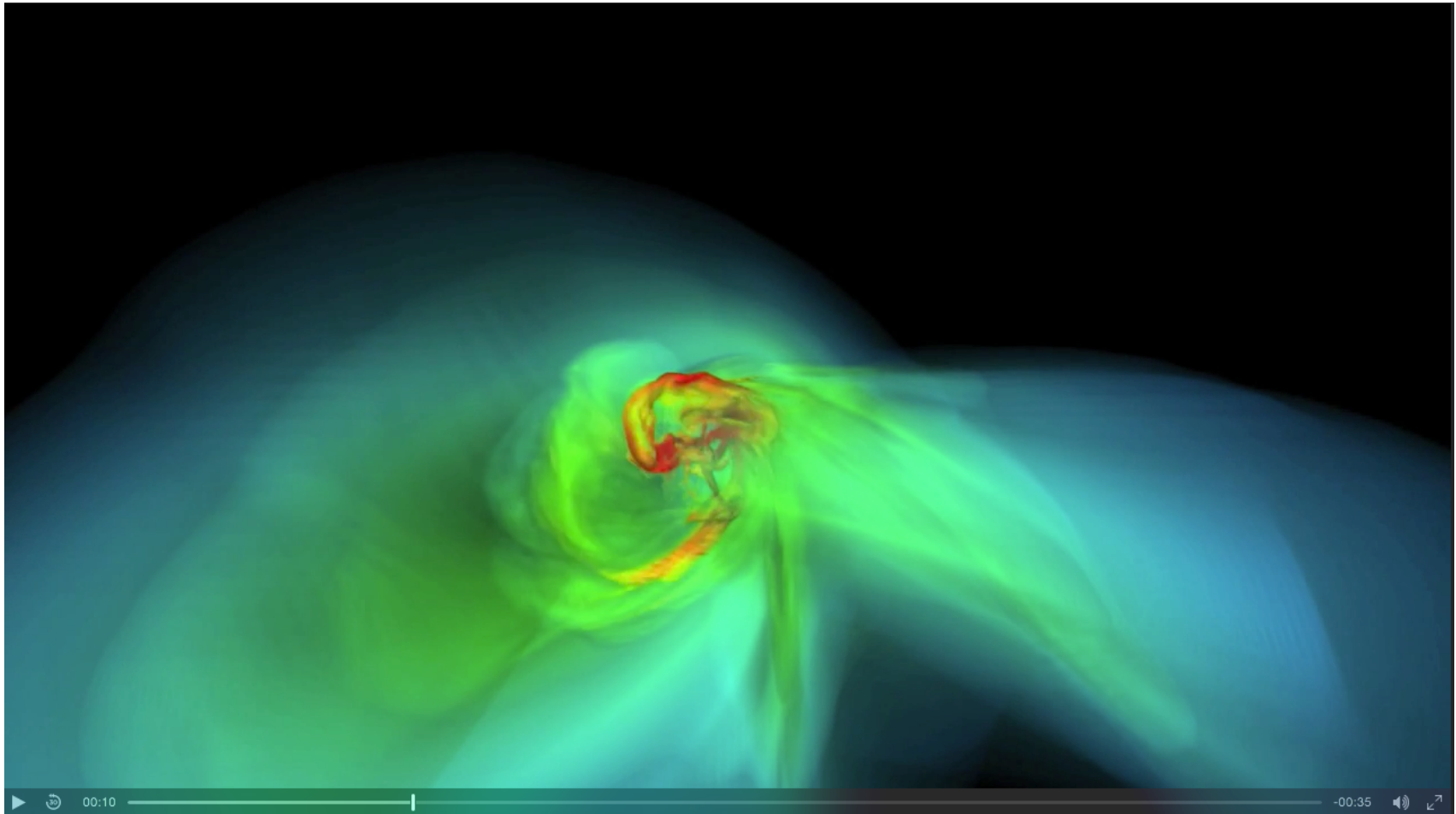
La explosión de una supernova a partir del colapso de una gigante roja genera una onda de choque que muestra cómo se difunden en el universo circundante elementos como el oxígeno y el hierro.



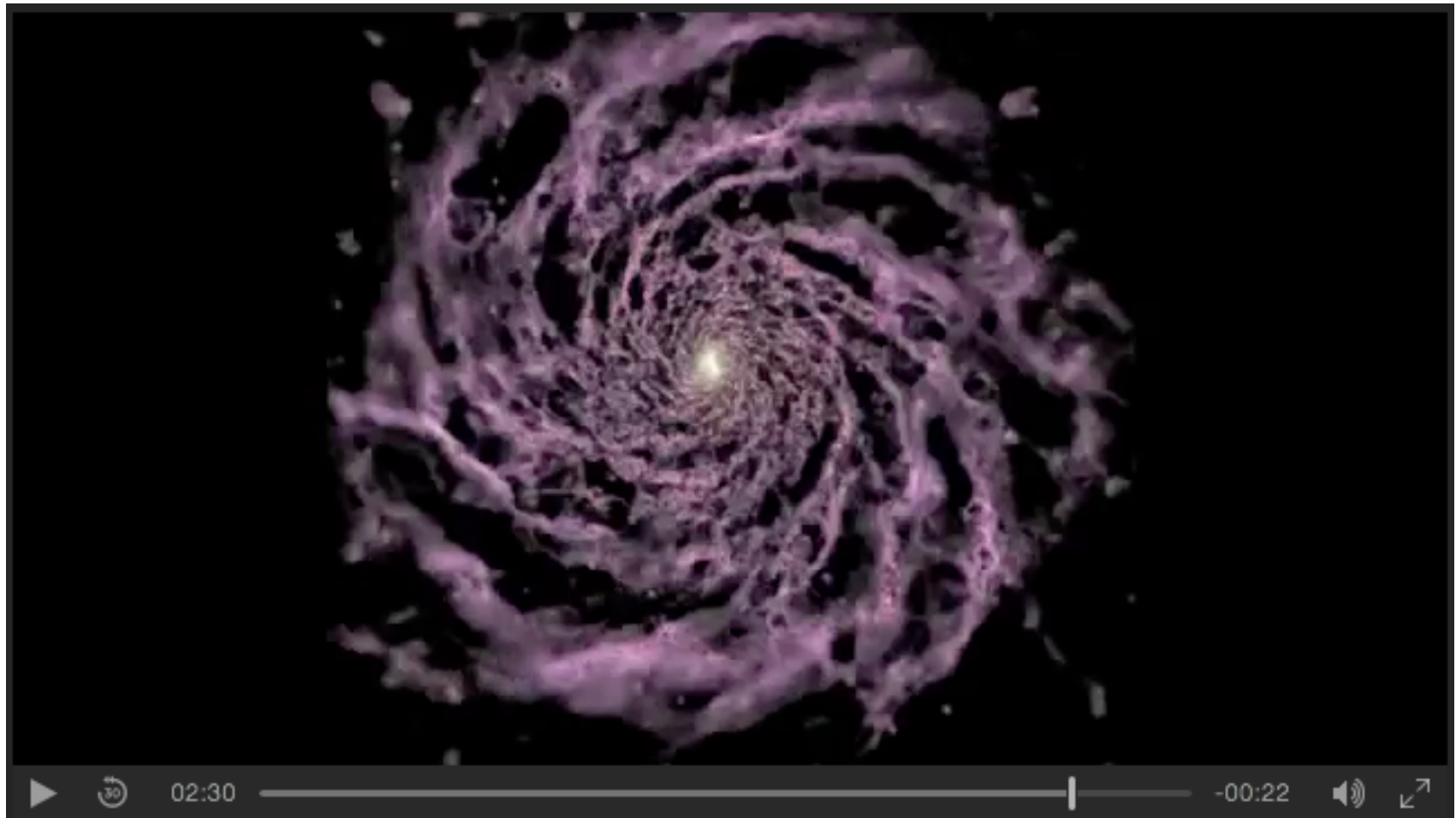
Nuevas simulaciones sobre la formación de estrellas masivas muestran que éstas pueden crecer potencialmente sin límite. (Las simulaciones se hicieron en un laboratorio de armas nucleares).



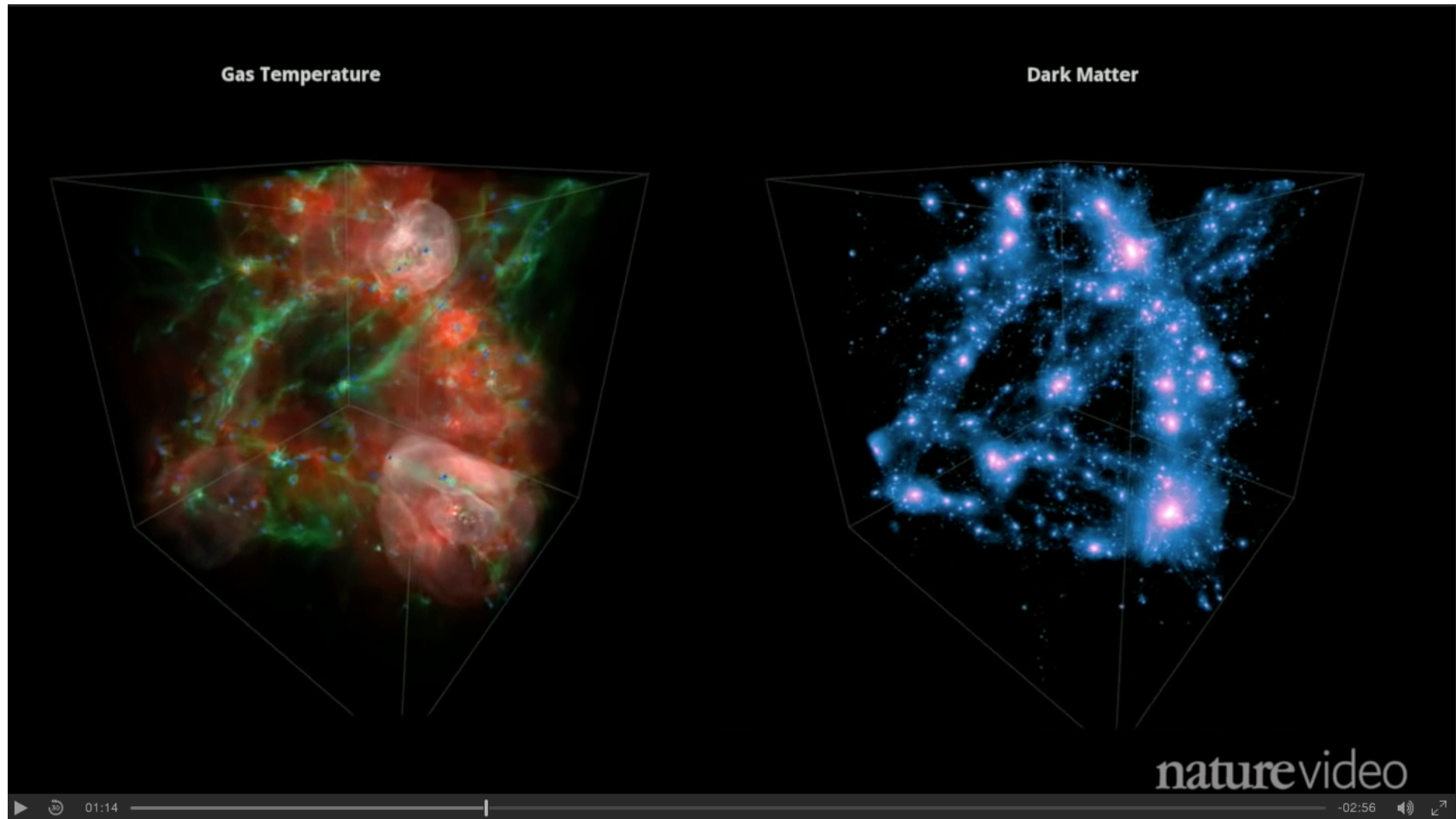
# Formación y evolución estelar



# Formación de galaxias



# Estructura a gran escala



# Dinámica de fluidos



## Navier-Stokes Equations 3 - dimensional - unsteady



Coordinates: (x,y,z)    Time: t    Density:  $\rho$     Pressure: p    Reynolds Number: Re  
Velocity Components: (u,v,w)    Stress:  $\tau$     Heat Flux: q    Prandtl Number: Pr

**Continuity:** 
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0$$

**X - Momentum:** 
$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re_r} \left[ \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} \right]$$

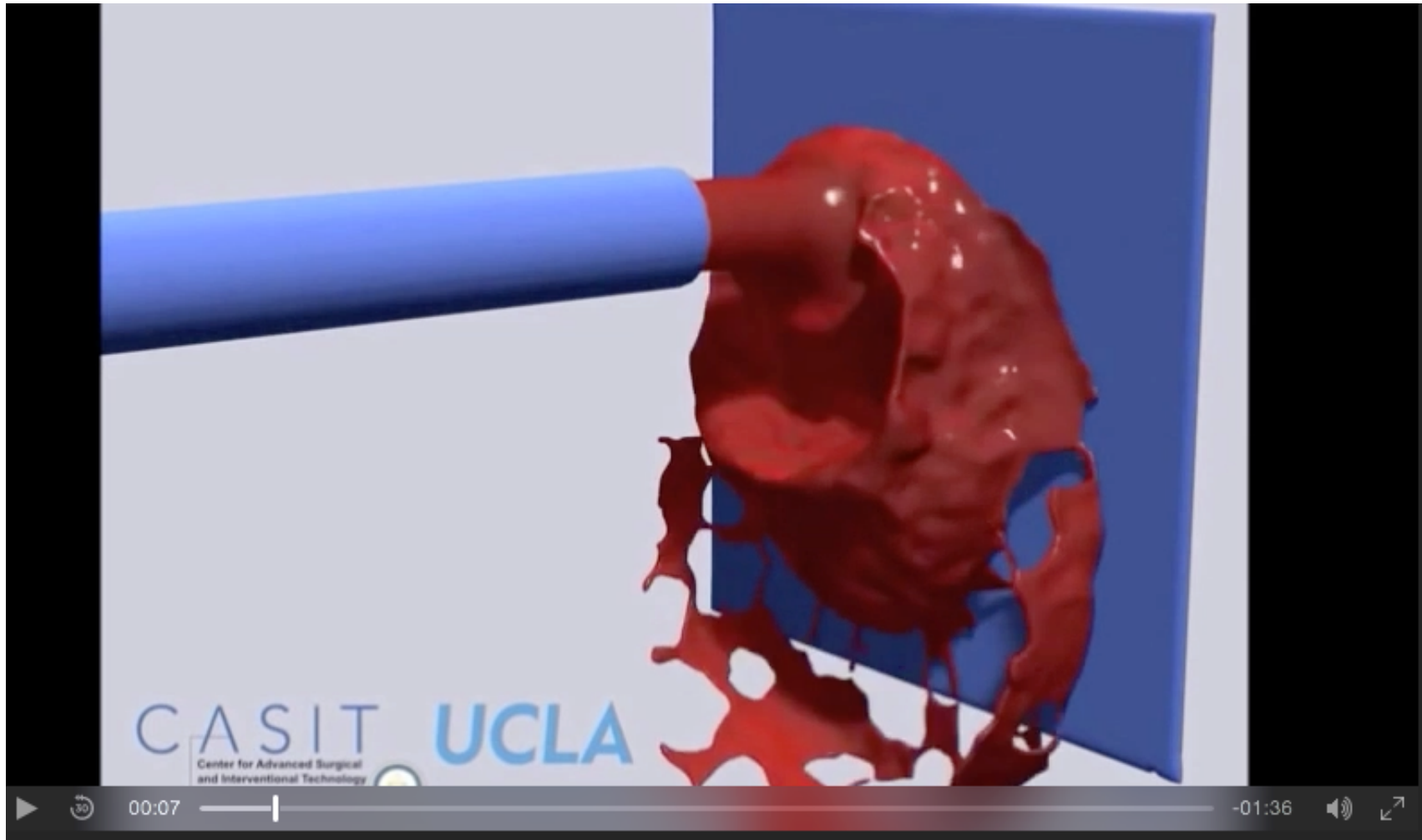
**Y - Momentum:** 
$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re_r} \left[ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} \right]$$

**Z - Momentum:** 
$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re_r} \left[ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right]$$

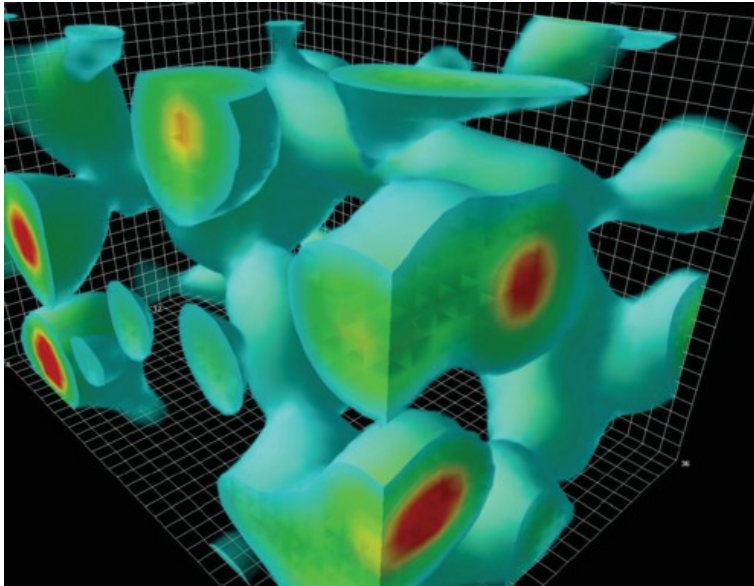
**Total Energy - Et:** 
$$\frac{\partial(E_T)}{\partial t} + \frac{\partial(uE_T)}{\partial x} + \frac{\partial(vE_T)}{\partial y} + \frac{\partial(wE_T)}{\partial z} = -\frac{\partial(up)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} + \frac{1}{Re_r} \left[ \frac{\partial}{\partial x} (u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + w \tau_{xz}) + \frac{\partial}{\partial y} (u \tau_{xy} + v \tau_{yy} + w \tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z} (u \tau_{xz} + v \tau_{yz} + w \tau_{zz}) \right] - \frac{1}{Re_r Pr_r} \left[ \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right]$$

Gran parte de la dinámica de fluidos se basa en la resolución de ecuaciones en derivadas parciales no-lineales

# Dinámica de fluidos

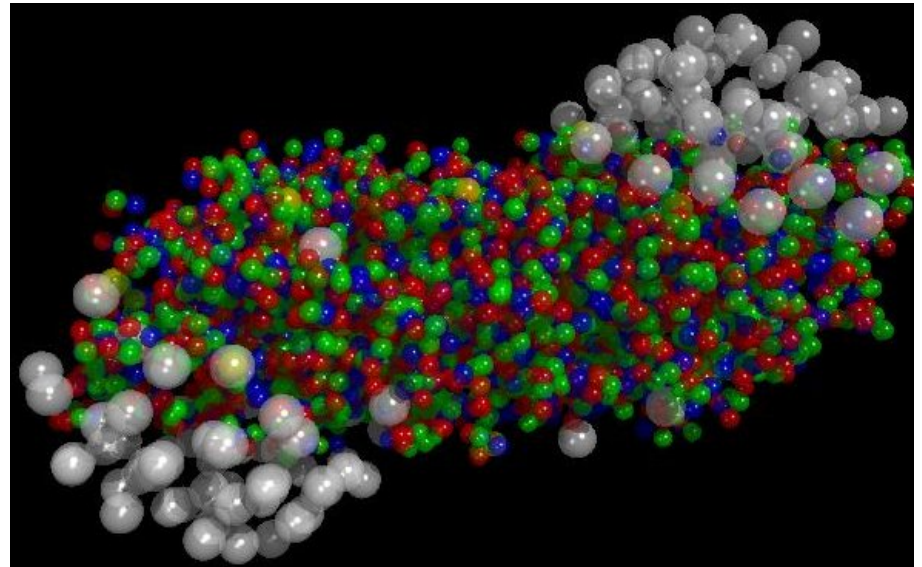


# Física de partículas

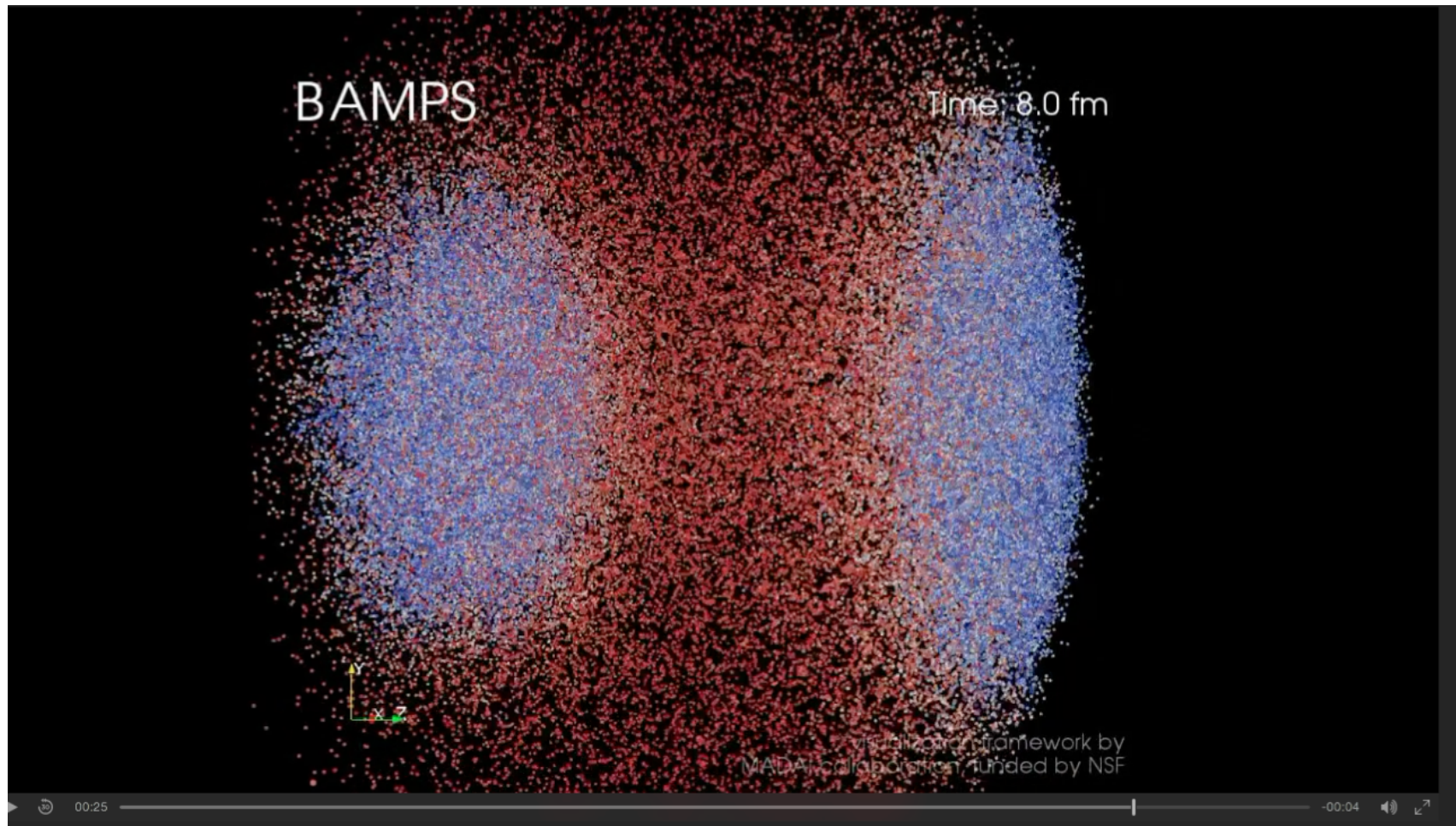


Simulación QCD de las fluctuaciones del campo de quarks y gluones.

Colisión Pb-Pb: las bolas blancas son protones y neutrones; las de color son quarks libres.



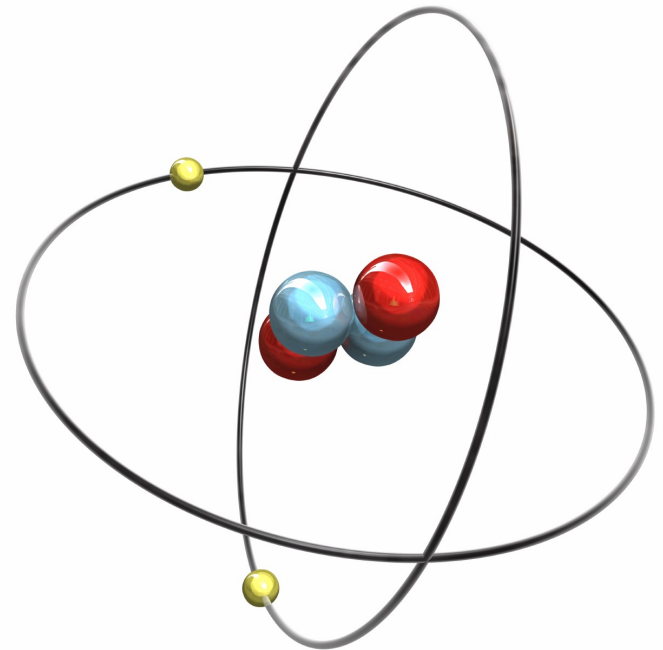
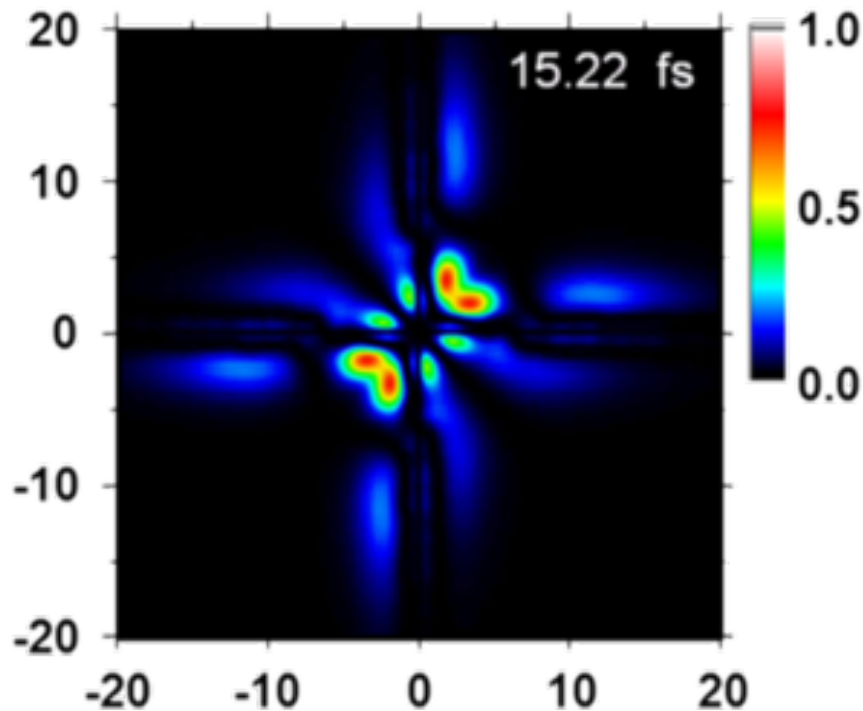
# Física de partículas



ALICE-LHC

# Física cuántica

- Muy pocos sistemas cuánticos permiten una solución analítica



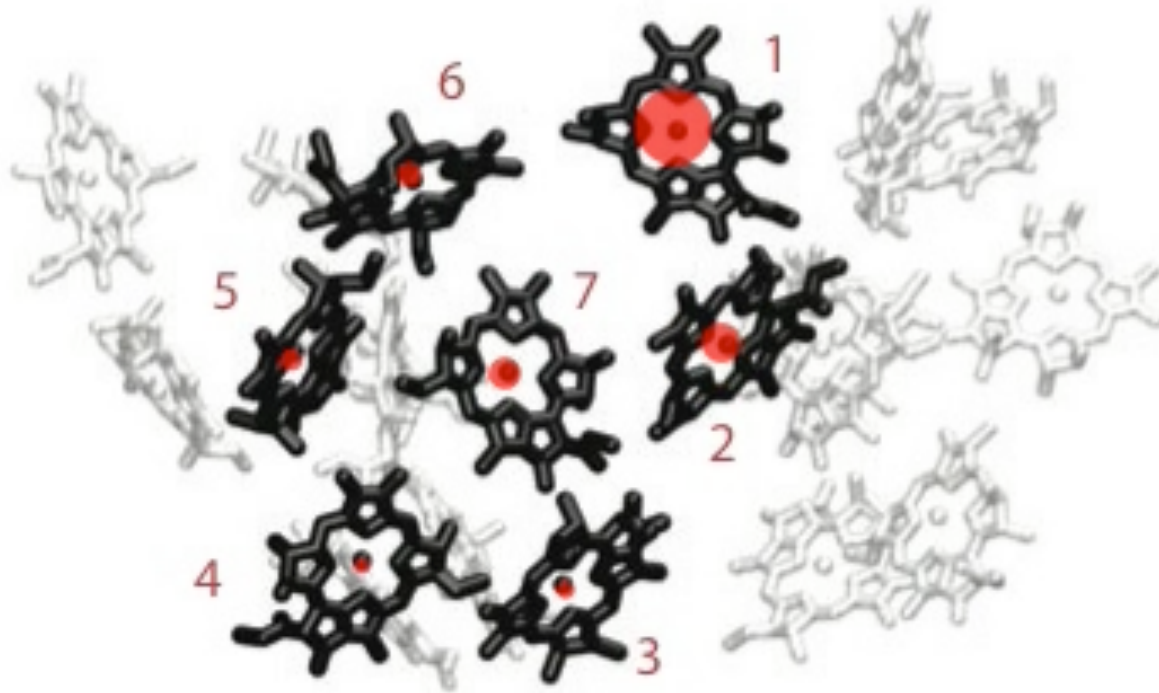
Función de onda de los dos electrones de un átomo de Helio doblemente excitado.

[Max Planck Institute for Nuclear Physics.](#)



# Física cuántica

- También se puede simular la dinámica de los sistemas cuánticos



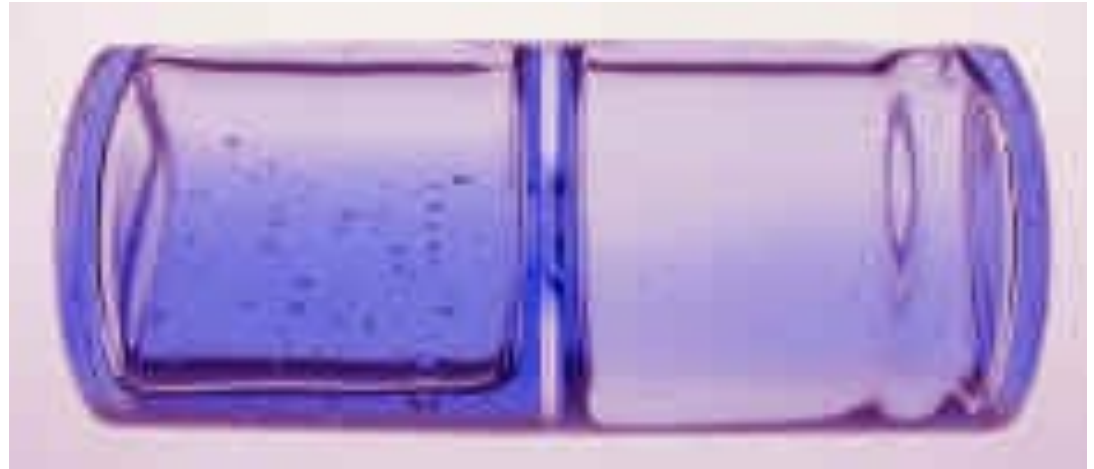
Simulación del transporte de una excitación en un compuesto fotosintético FMO

Otras veces, la simulación hace el papel del experimento...

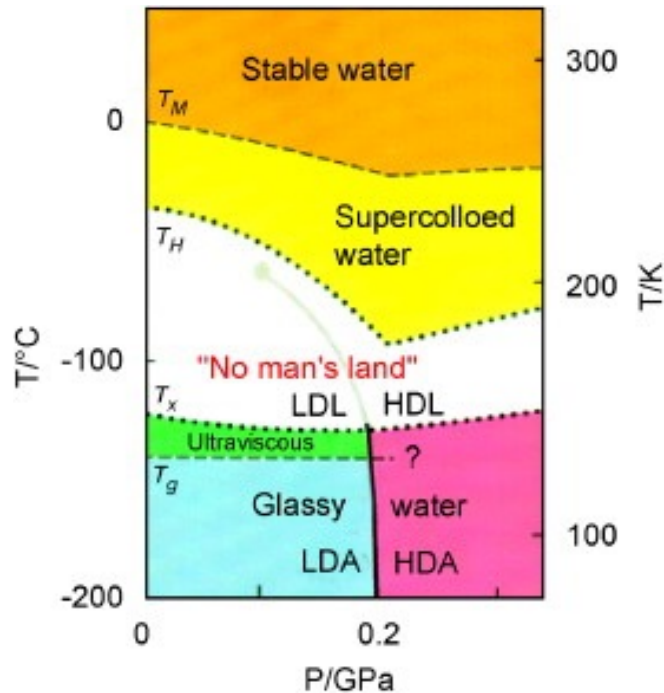
# Agua y materiales amorfos



Vidrios

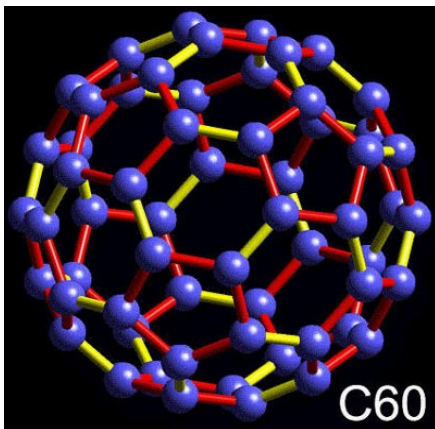


Los tiempos de relajación divergen en los vidrios e impiden realizar mediciones en equilibrio.

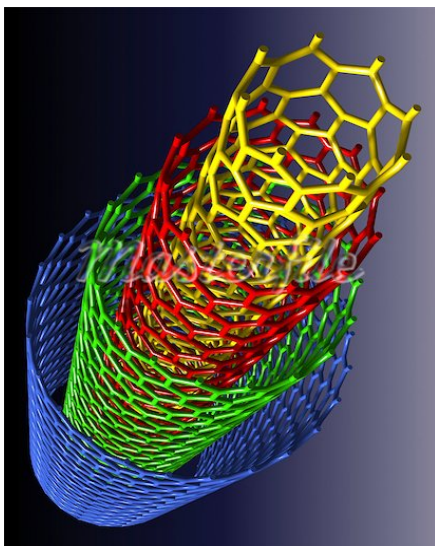


Vidrio metálico a base de titanio.

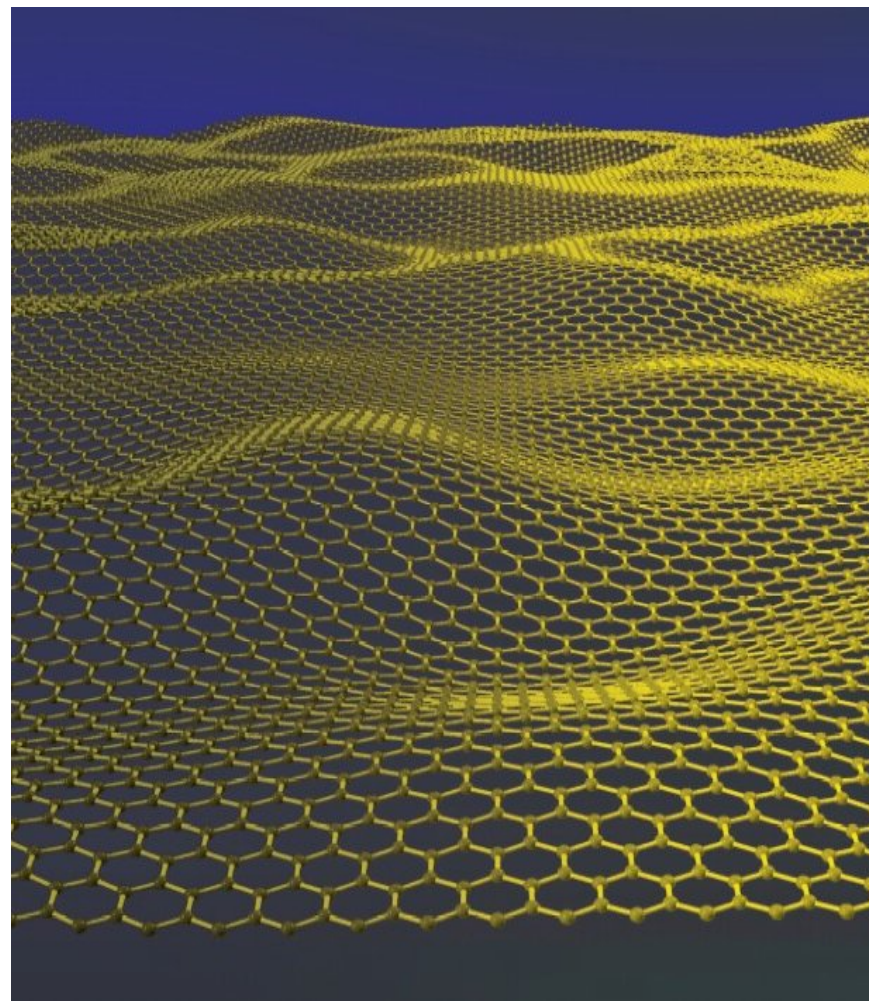
# Diseño de nuevas moléculas y materiales



Fulerenos  
(1985).

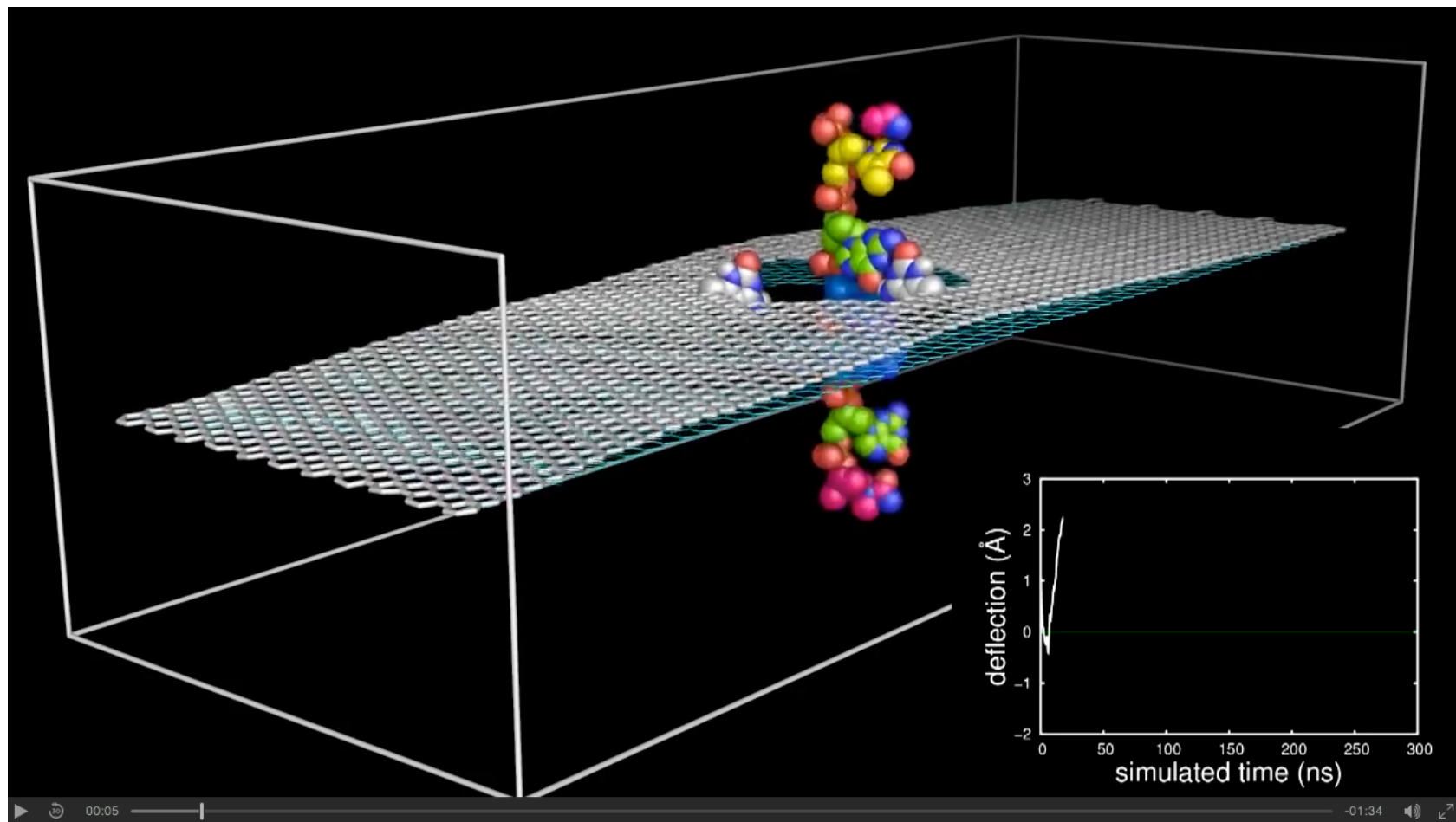


Nanotubos  
de carbono

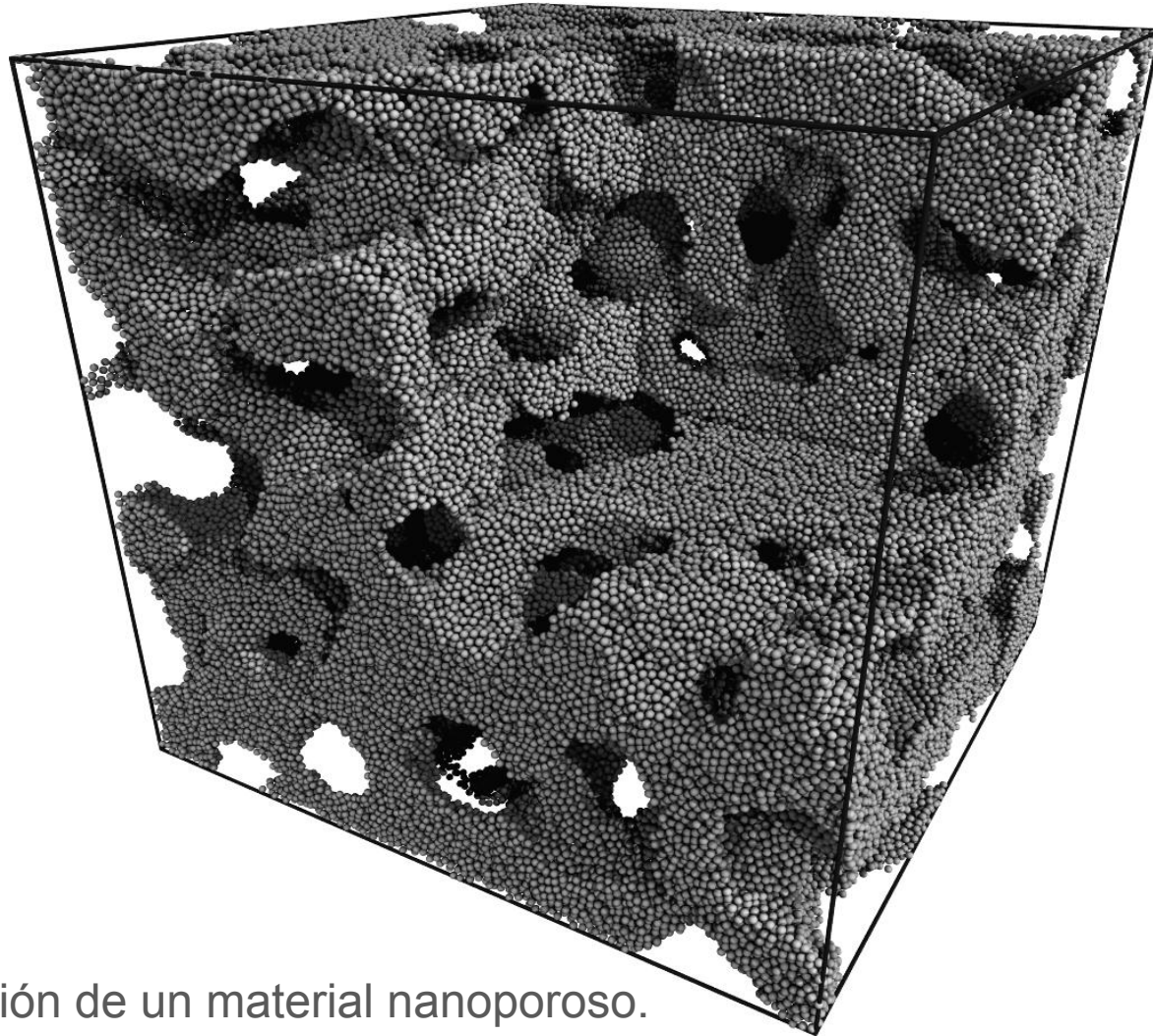


¡Grafeno! Premio Nobel del año 2010

# Grafeno + ADN



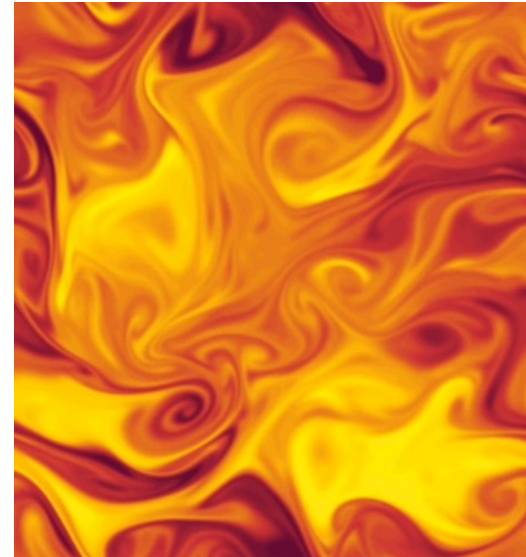
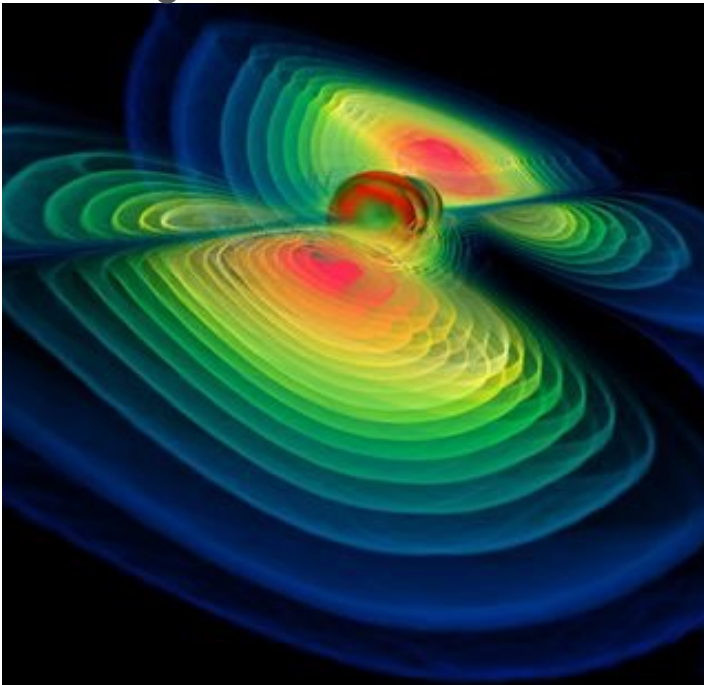
# Materiales estructurados



Simulación de un material nanoporoso.

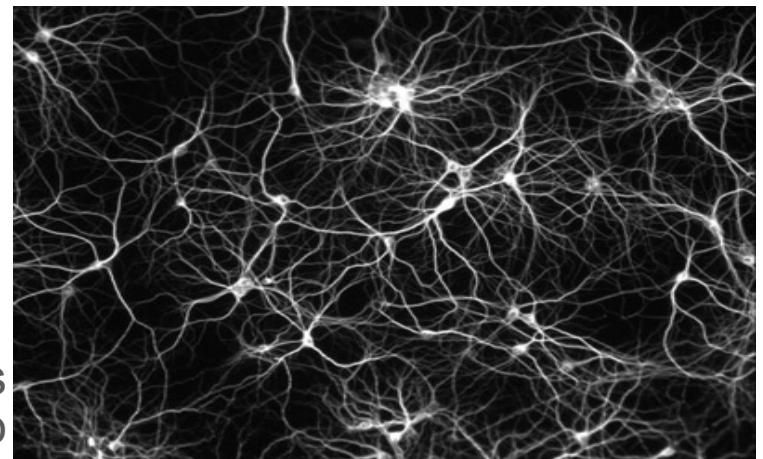
# Comprensión de fenómenos fundamentales

Relatividad General numérica:  
ondas gravitatorias.

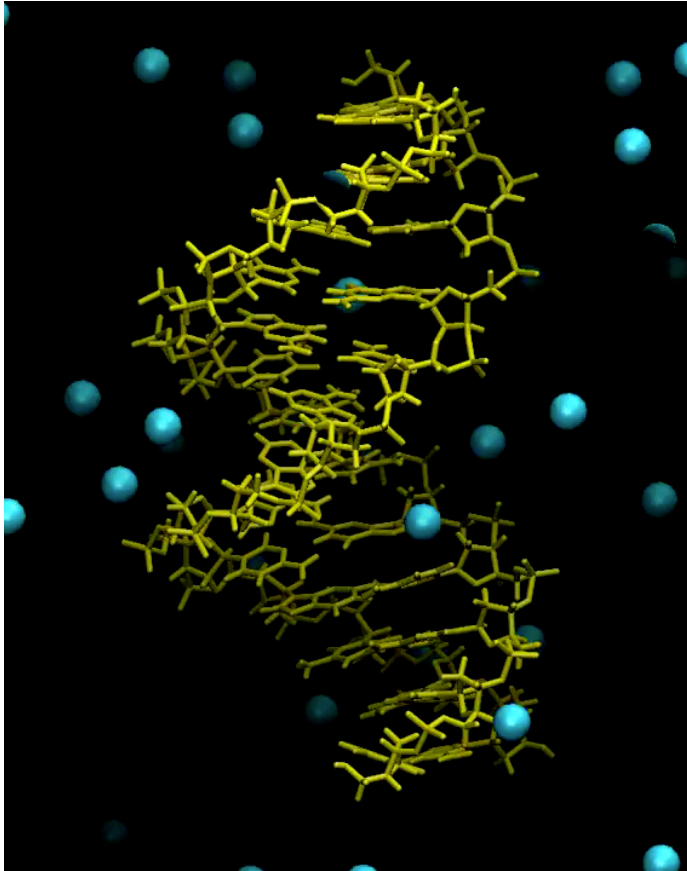


Turbulencia:  
patrones de flujo

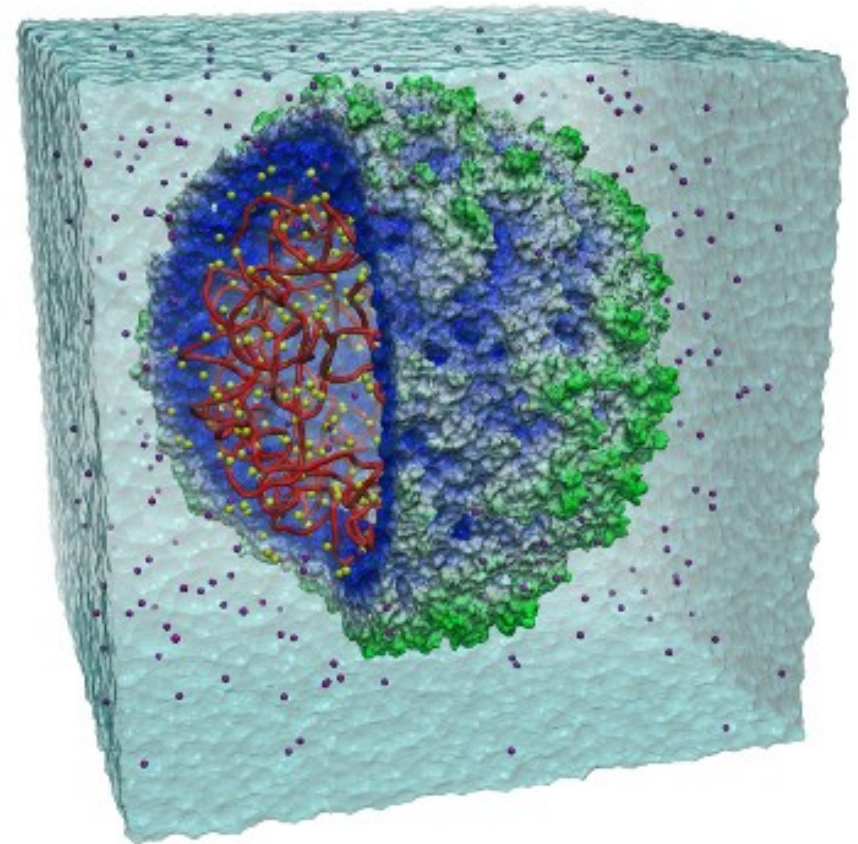
Neurociencia: modelos  
computacionales del cerebro



# Origen y estructura de la vida



Simulación de la dinámica molecular del ADN



Virus del mosaico del tabaco: 1 millón de átomos y tiempos de simulación de más de 50 ns.



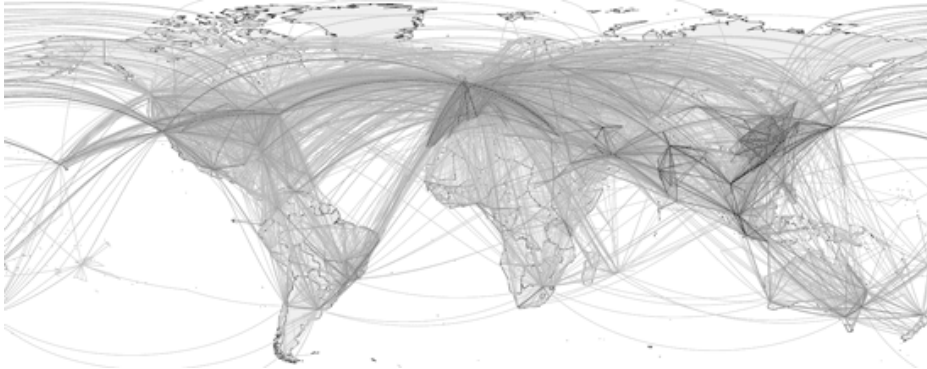
# Origen y estructura de la vida



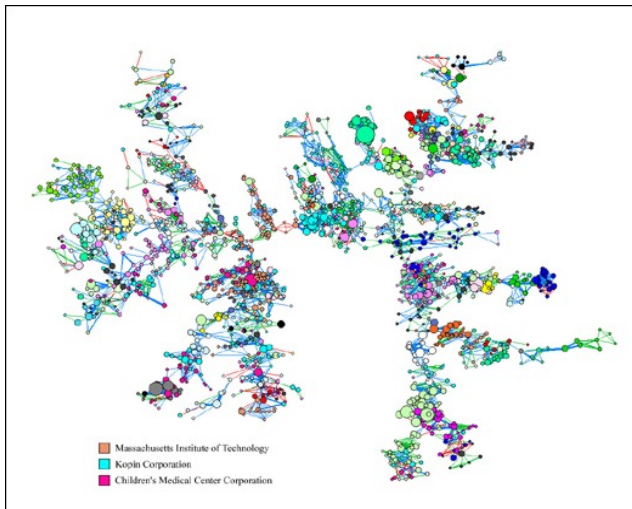
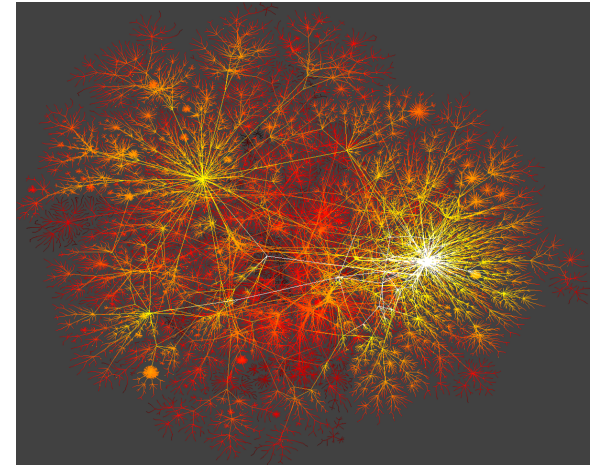
“**Alya Red: A Computational Heart**”, ha sido el vídeo de divulgación mejor valorado por el público en el concurso de la National Science Foundation de Estados Unidos. Este vídeo se ha realizado en el Centro de Supercomputación de Barcelona.

# Análisis de datos y estructuras complejas

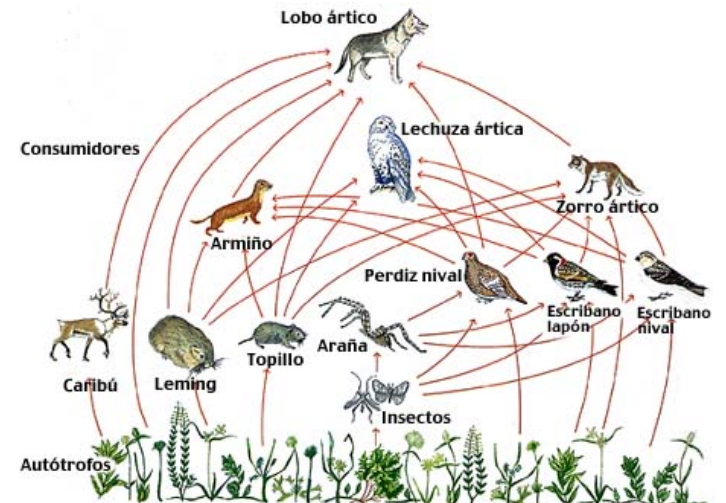
Red de aeropuertos



Internet



Red social en Boston



Redes metabólicas y biológicas

# No todo es perfecto: necesidad de análisis crítico



**50 predicciones meteorológicas distintas para Francia y Alemania del 24 de diciembre de 1999.** Todos los resultados provienen del mismo programa, ejecutado en los mismos ordenadores y con las mismas hipótesis acerca del comportamiento del tiempo atmosférico. Pequeñas variaciones en las **condiciones iniciales** conducen a predicciones radicalmente distintas. La mayoría de ellas preveían un agradable día invernal en París y, unas pocas, una tormenta peligrosa que resultó ser el **ciclón Lothar** que asoló la región con rachas de viento de 200 km/h provocando más de un centenar de muertos.

# Los humanos somos necesarios

## Predicción por Municipios. Granada (Granada)


















<b>Predicción</b>	Gráficas	El tiempo en su web
-------------------	----------	---------------------

Capital: Granada (altitud: 684 m)

Latitud: [37° 10' 35" N](#) - Longitud: [3° 36' 0" O](#) - Posición: [Ver localización](#) ▶

[Ver tabla detallada](#) ▶

[Descargar XML de la predicción detallada de Granada](#) 

Fecha	vie 15			sáb 16				dom 17		lun 18		mar 19	mié 20	jue 21
	6-12	12-18	18-24	0-6	6-12	12-18	18-24	0-12	12-24	0-12	12-24			
Estado del cielo														
Prob. precip.	0%	0%	0%	0%	5%	5%	5%	5%	40%	50%	55%	70%	60%	60%
Cota nieve prov.(m)									1700	1900	1900	1700	1600	1800
Temp. mín./máx. (°C)		4 / 18			5 / 17			5 / 16		8 / 16		7 / 14	5 / 15	6 / 17
Viento (km/h)	-	-	-	-	↗	↗	-	→	↗	↑	↑	←	↘	↘
Indice UV máximo		3			3			3		4		3		
Avisos		 Sin Riesgo ▶			 Sin Riesgo ▶			 Sin Riesgo ▶						

Según la **AEMET**, estas predicciones por municipios “*se generan de forma automática mediante el tratamiento estadístico de los resultados de modelos numéricos de predicción meteorológica. Esto puede dar lugar ocasionalmente a que no coincidan totalmente con las demás predicciones realizadas por la Agencia, que son elaboradas por predictores que interpretan y adecuan los resultados de los modelos*”. En las predicciones por provincias intervienen **meteorólogos**, son sólo a dos días y con frecuencia difieren sustancialmente de las anteriores.

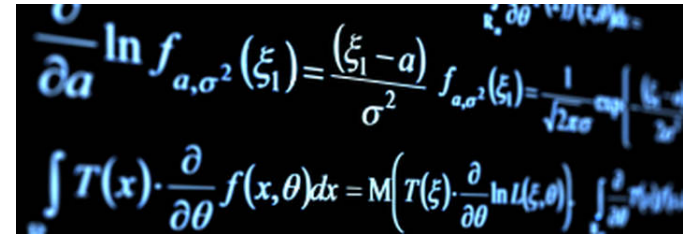
# Física computacional

## ■ **Características** de un problema de Física computacional

- Tiene una formulación matemática precisa.
- Es intratable por métodos analíticos.

## ■ Un **físico computacional** necesita:

- Excelentes fundamentos en física.
- Base firme en matemáticas aplicadas.
- Tener un conocimiento profundo del problema.
- Conocer los ordenadores y su arquitectura.



The image shows two mathematical formulas written on a blackboard. The top formula is the derivative of the natural logarithm of a normal distribution function with respect to the mean parameter  $a$ . The bottom formula is the expectation value of a function  $T(x)$  with respect to a parameter  $\theta$ , expressed as an integral over the probability density function  $f(x, \theta)$ .

$$\frac{\partial}{\partial a} \ln f_{a, \sigma^2}(\xi_1) = \frac{(\xi_1 - a)}{\sigma^2} f_{a, \sigma^2}(\xi_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(\xi_1 - a)^2}{2\sigma^2}\right) \cdot \frac{(\xi_1 - a)}{\sigma^2}$$
$$\int T(x) \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} f(x, \theta) dx = M\left(T(x) \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \ln f(x, \theta)\right)$$

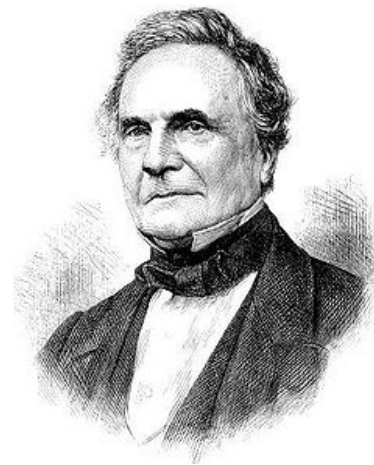
## ■ **Objetivos:**

- Uso creativo del ordenador para resolver problemas de física.
- Desarrollar nuevos algoritmos para ello (ejemplo: FFT)

# Pequeña historia de los ordenadores

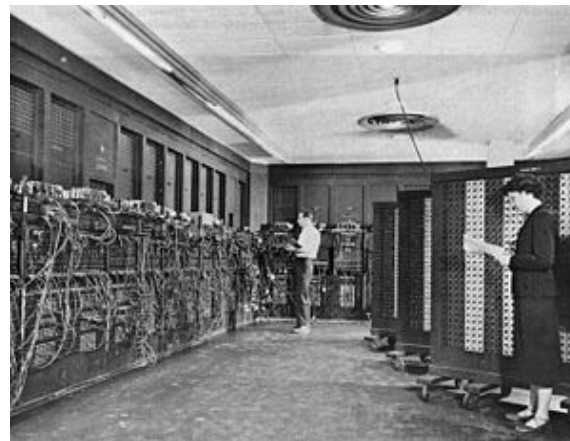
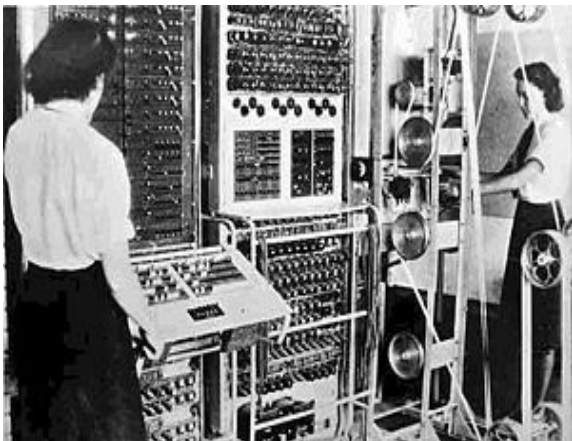
## ■ La era mecánica (1623-1945)

- Principios del siglo XVII (**Schickhard, Leibnitz, Pascal**): máquinas para resolver problemas matemáticos
- Primeros aparatos programables: máquina de diferencias y máquina analítica, de **C. Babbage**
- 1853: G. y H. Scheutz construyen **máquina analítica reducida**. Se usa en NY para calcular la **órbita de Marte**



# Pequeña historia de los ordenadores

- ▣ **Primera generación de ordenadores electrónicos (1937-1953)**
  - ▣ **Interruptores electrónicos**, en forma de tubos de vacío, en lugar de relés electro-mecánicos
  - ▣ **1937**: Ordenador electrónico por **J.V. Atanasoff** (no prog.)
  - ▣ **1943**: **A. Turing** diseña **Colossus** para romper los códigos secretos alemanes
  - ▣ **1945**: **ENIAC**, primer ordenador programable. Cálculos balísticos y diseño de la **bomba de hidrógeno**
  - ▣ **J. von Neumann diseña EDVAC**: programa en memoria



# Pequeña historia de los ordenadores

## ■ Segunda Generación (1954-1962)

- Importantes desarrollos en la arquitectura, circuitos y lenguajes de programación
- Interruptores electrónicos basados en transistores
- Nuevos ordenadores: TRADIC, TX-0, IBM
- Lenguajes de alto nivel: **FORTAN** (1956), ALGOL (1958) y COBOL (1959)

## ■ Tercera Generación (1963-1972)

- Gran incremento en la potencia de cálculo
- Innovaciones: **circuitos integrados, memorias de semiconductor, programación en paralelo, sistemas operativos y tiempo compartido**
- CDC 6600 por S. **Cray**: 1 millón de operaciones de coma flotante por segundo (**1 Mflops**)





# Pequeña historia de los ordenadores

## ■ Cuarta generación (1972-1984)

- Circuitos integrados con muchos componentes (100k/chip)
- Ordenadores: CRAY 1, CRAY X-MP y CYBER 205
- Desarrollo del **lenguaje C** y del sistema operativo **UNIX**, ambos realizados en los laboratorios Bell
- **El UNIX se estandariza**: el usuario ya no tiene que aprender un nuevo SO cada vez que cambia ordenador

## ■ Quinta Generación (1984-1990)

- Uso extendido del **procesado en paralelo** y fabricación de chips con millones de componentes

## ■ Actualidad

- Ordenadores **portátiles**, universalización del procesador (teléfonos, tablets, e-readers, DNle, detectores)
- **Superordenadores**: ver <http://top500.org>



# PROTEUS

- Potencia de cálculo: 13 Teraflops (13 10<sup>12</sup> operaciones en doble precisión por segundo)
- Memoria principal: 2,8 Terabytes (5 nodos con 114GB cada uno de ellos)
- Almacenamiento: 50 Terabytes (espacio principal)
- Núcleos de ejecución: 1100 núcleos + 2 tarjetas GPGPU
- Número de nodos: 125
- Duración media por trabajo enviado: 35 días

[Proteus web](#)

# PROTEUS

## PROTEUS scientific computing cloud

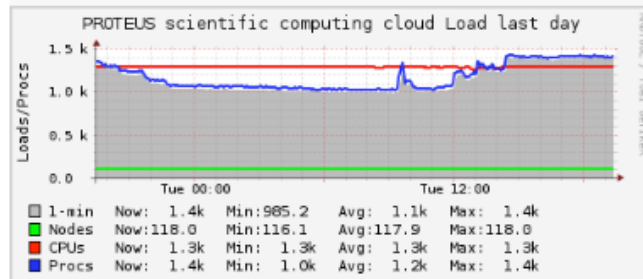
[Inicio](#)[Información](#)[Estado](#)[Uso](#)[Servicios Adicionales](#)[Prensa](#)[Contacto](#)

### PROTEUSTV

## Bienvenido/a

Bienvenido/a al portal del Servicio de Computación PROTEUS. Aquí puede encontrar información de interés sobre sus características, uso e información adicional.

### Carga de trabajo CPUs



### Últimas noticias

16/05/2013 Nueva página web

- En desarrollo la nueva página web de PROTEUS. Espero que te guste!

31/11/2013 Nacimiento de PROTEUS TV

- Comienza la emisión en pruebas del canal divulgativo PROTEUS TV.

[proteus.ugr.es](http://proteus.ugr.es)