

# Modelización de Propiedades y Procesos de Materiales

Introducción al Modelado y Simulación  
Computacional de Materiales



Guillermo Marzik  
(CAC 7100 –  
[guillermomarzik@integra.cnea.gob.ar](mailto:guillermomarzik@integra.cnea.gob.ar))



Ruben Weht  
(CAC 7104 - [rweht@unsam.edu.ar](mailto:rweht@unsam.edu.ar))

# Modelización de Propiedades y Procesos de Materiales

Introducción al Modelado y Simulación  
Computacional de Materiales

Docentes de  
cursos previos:



Juan I. Ramallo

Mariano Forti

Tristana Sondón

# Modelado y Simulación: Calendario

**Martes y Viernes: 16:15 a 18:15 hs  
(29 días de Clases + Exposición Final)**

## INGENIERÍA EN MATERIALES – CALENDARIO MARZO-JULIO 2025

- |  |   |
|--|---|
| <span style="color: green;">█</span> Inicio de clases: Miércoles 5 de Marzo  | <span style="color: green;">█</span> Fin del cuatrimestre: 30 de Junio (incluidos exámenes parciales) |
| <span style="color: yellow;">█</span> Exámenes finales (1 al 15 de Julio).   |   |
| <span style="color: blue;">█</span> Vacaciones (17 de Julio al 01 de Agosto) |   |

2025																																		
D	L	M	M	J	V	S	D	L	M	M	J	V	S	D	L	M	M	J	V	S	D	L	M	M	J	V	S							
MARZO							ABRIL							MAYO							JUNIO							JULIO						
9	10	11	12	13	14	15	6	7	8	9	10	11	12	4	5	6	7	8	9	10	8	9	10	11	12	13	14	6	7	8	9	10	11	12
16	17	18	19	20	21	22	13	14	15	16	17	18	19	11	12	13	14	15	16	17	15	16	17	18	19	20	21	13	14	15	16	17	18	19
23	24	25	26	27	28	29	20	21	22	23	24	25	26	18	19	20	21	22	23	24	22	23	24	25	26	27	28	20	21	22	23	24	25	26
30	31						27	28	29	30				25	26	27	28	29	30	31	29	30						27	28	29	30	31	1	

### Feriados:

- 3 y 4 de Marzo (Lunes y Martes). Carnaval y Feriado puente turístico.
- 24 de Marzo (Lunes). Día Nacional de la Memoria por la Verdad y la Justicia.
- 2 de Abril (Miércoles). Día del Veterano y de los Caídos en la Guerra de Malvinas.
- 17 y 18 de Abril (Jueves y Viernes). Jueves y Viernes Santo.
- 1 y 2 de Mayo (Jueves y Viernes). Día del trabajador y Feriado puente turístico.
- 25 de Mayo (Domingo). Día de la Revolución de Mayo.
- 16 de Junio (Lunes). Paso a la Inmortalidad del Gral. Don Martín M. de Güemes.
- 20 de Junio (Viernes). Paso a la Inmortalidad del Gral. Manuel Belgrano.
- 27 de junio (Viernes). Día del Empleado de la APN
- 9 de Julio (Miércoles). Día de la Independencia.

# Modelado y Simulación

---

Correo de consultas: **model.sabato@gmail.com**

Aula Virtual: **<https://modelsabato.github.io/2025/>**

Aula temporaria:

**<https://github.com/rweht-unsam/Model-Sabato.github.io>**

# Modelización y simulación computacional

---

**Modelo:** Representación simplificada de un sistema real, pero que captura los aspectos esenciales que se quieren estudiar.

Se los usa para **describir** o **explicar** un cierto fenómeno o incluso para **predecir** su comportamiento.

Es claramente una **idealización**

La mayoría de las veces es difícil satisfacer simultáneamente que el modelo sea suficientemente **simple (resoluble)** pero **completo**.

Desde el principio mismo de la ciencia se realizaron modelos:

Ideas de masa puntual, oscilador ideal, superficies sin rozamiento, etc.

No hacen falta computadoras para hacerlos!!!

---

# Modelización y simulación computacional

---

Una vez formulado un modelo, la **simulación** es llevarlo a la práctica en un caso concreto.

**Todos los desarrollos científicos y tecnológicos se basaron en estas dos premisas.**

Por mucho tiempo la simulación se pudo realizar solo de manera muy aproximada y simplificada  
**(son pocos los problemas que tienen solución exacta)**

En los últimos años se agregó un nuevo ingrediente:  
**Computadoras cada vez más rápidas y eficientes a costos relativamente económicos.**

Este avance **y los desarrollos en las técnicas de programación**, hicieron posible la simulación de sistemas en situaciones cada vez **más realistas**.

# Simulación computacional: para qué?

---

- ❖ Permite entender y explicar resultados experimentales.
  - ❖ Traslada resultados teóricos a situaciones realistas, donde puedan ser testeados experimentalmente.
  - ❖ Permite extraer comportamientos a situaciones difíciles de alcanzar experimentalmente (grandes presiones como en el núcleo terrestre, con ondas de choque, a grandes temperaturas, en ambientes con radiación, etc.).
  - ❖ Muchas veces trabaja “on line” con ciertos experimentos, que no se podrían hacer sin una simulación simultánea.  
**Actualmente casi siempre!!**
  - ❖ Permite optimizar los parámetros de un proceso.
  - ❖ Da la posibilidad de **predecir** nuevos comportamientos, nuevos materiales, nuevos dispositivos, etc.
-

# Simulación computacional: campos de aplicación

---

- Física
- Ciencia de Materiales
- Química
- Biología / Biotecnología
- Geología / Meteorología
- Ingeniería
- Nanotecnología

**Todas las empresas electrónicas, químicas, farmacéuticas y de alta tecnología tienen grupos de simulación computacional, tanto de propiedades de materiales como de procesos.**

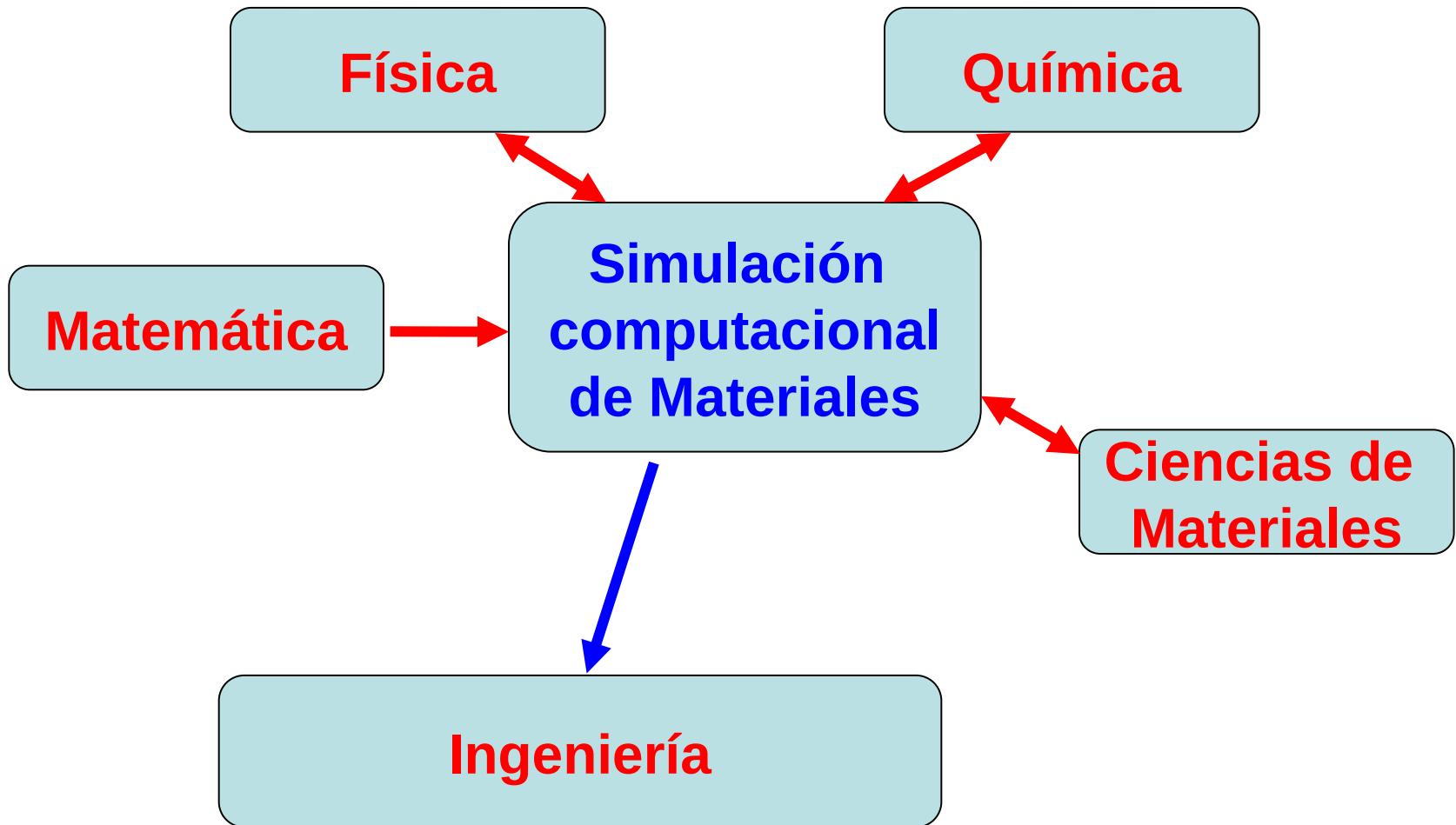
**Nuestra vida diaria está influida constantemente por simulaciones y modelizaciones**

**Ej: Mercado Libre, NETFLIX, bancos, empresas de servicios, etc**

---

# Simulación computacional de materiales: bases

---



# ¿Cómo formular un modelo y simularlo?

---

- Individualizar el problema físico a estudiar:  
**Determinar qué es el *sistema* y qué es el *medio***  
**Individualizar las escalas de tiempo y distancias involucradas**
- Determinar una teoría pertinente y las variables importantes del problema a estudiar (**si las variables son escalares o vectoriales, la interacción con el medio, etc.**)
- Llevar el modelo físico a un problema matemático adecuado (sistema de ecuaciones lineales, ec. diferenciales ordinarias o en derivadas parciales, de autovalores, optimización, etc.)
- Desarrollar o aplicar un algoritmo numérico para tratar el modelo, compatible con su simulación
- Escribir un código computacional que lo resuelva
- Realizar el **experimento** computacional
- Analizar los resultados (mediante gráficos, tablas, curvas)
- Iterar, si hiciera falta! (**y muchas veces!**)

**A menudo involucra cambiar la forma de pensar un problema!!**

---

# Cómo realizar una modelización computacional?

- Individualizar el problema físico a estudiar:  
**Determinar qué es el *sistema* y qué es el *medio***  
**Individualizar las escalas de tiempo y distancias involucradas**
- Determinar una teoría pertinente y las variables importantes del problema a estudiar (**si las variables son escalares o vectoriales, la interacción con el medio, etc.**)
- Llevar el modelo físico a un problema matemático adecuado (sistema de ecuaciones lineales, ec. diferenciales ordinarias o en derivadas parciales, de autovalores, optimización, etc.)
- Desarrollar o aplicar un algoritmo numérico para tratar el modelo, compatible con su simulación
- Escribir un código computacional que lo resuelva
- Realizar el **experimento** computacional
- Analizar los resultados (mediante gráficos, tablas, curvas)
- Iterar, si hiciera falta! (**y muchas veces!**)

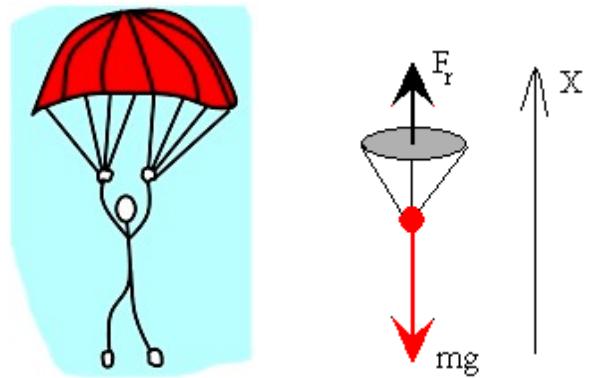
**A menudo involucra cambiar la forma de pensar un problema!!**

# Ejemplo trivial: descenso de un paracaidista

Modelo: Segunda Ley de Newton, con un término de rozamiento

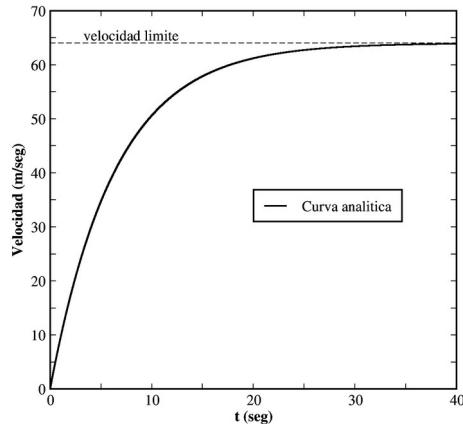
Ecuación a resolver

$$m \frac{dv}{dt} = mg - \gamma v$$



Trivialmente podemos ver que la ecuación diferencial tiene solución exacta:

$$v = \frac{gm}{\gamma} \left(1 - e^{-(\gamma/m)t}\right)$$



Existe una Velocidad Límite:

$$v = \frac{gm}{\gamma}$$

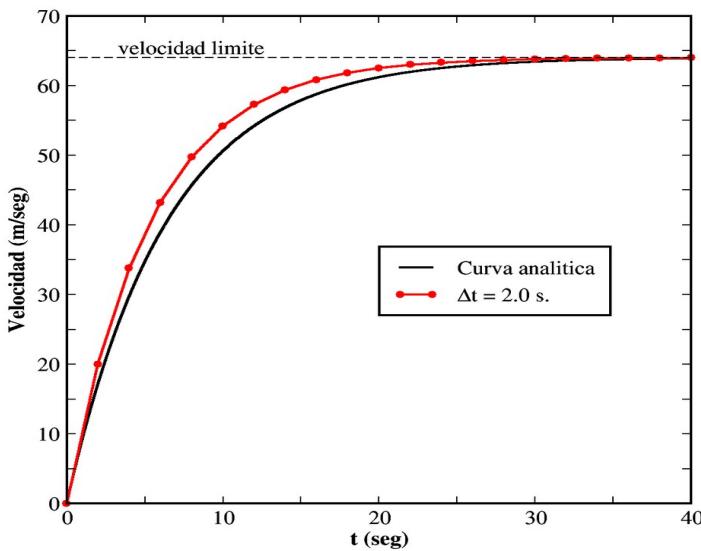
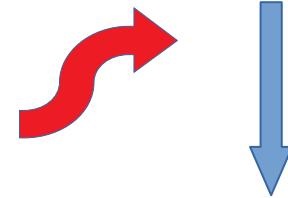
# Ejemplo trivial: descenso de un paracaidista

¿Cómo se piensa computacionalmente?

$$m \frac{dv}{dt} = mg - \gamma v \quad \xrightarrow{\text{ }} \quad \frac{v_{i+1} - v_i}{\Delta t} = g - \frac{\gamma}{m} v_i \quad \xrightarrow{\text{ }} \quad v_{i+1} = v_i + \left( g - \frac{\gamma}{m} v_i \right) \Delta t$$

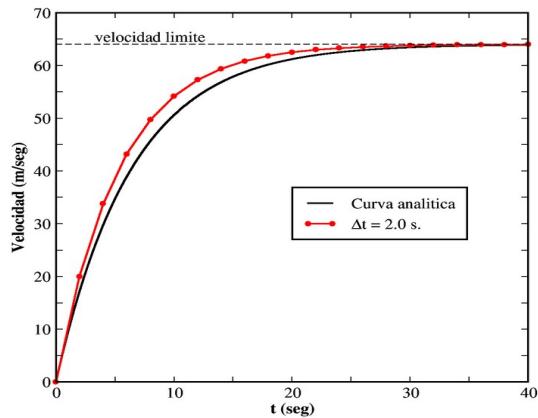
Métodos numéricos  
(discretización)

Métodos de  
Programación



Resultado  
(informe técnico,  
paper, etc)

# Ejemplo trivial: descenso de un paracaidista



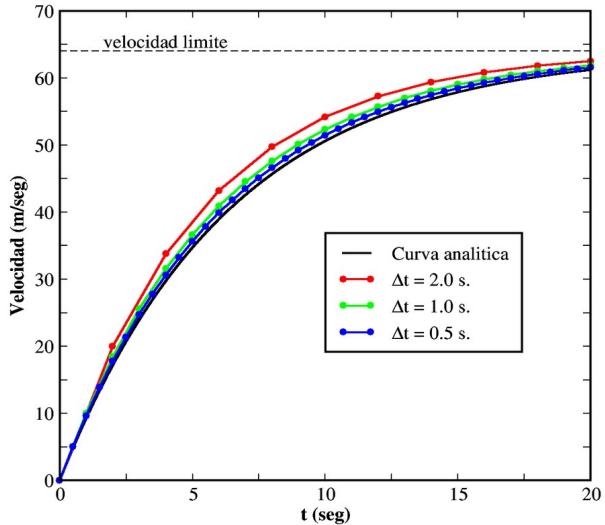
**Siempre hay un error numérico!.  
En Simulación Computacional  
se debe convivir con los errores  
numéricos!!**

**Hay que acotarlos o al menos  
conocerlos**

**Se puede disminuir el error con  
mejores parámetros o con un  
mejor método de cálculo.**

**En nuestro caso se puede  
disminuir el intervalo  $\Delta t$  en**

$$v_{i+1} = v_i + \left( g - \frac{\gamma}{m} v_i \right) \Delta t$$



**Moraleja: Siempre hay que chequear el resultado!!**

# Errores

---

**Siempre en un cálculo numérico hay un error**

**Debemos intentar reducirlo o, al menos, conocerlo, acotarlo**

**Hay dos fuentes de error típicos:**

- **Error de redondeo**
- **Error de truncamiento**

**Error de redondeo:**

- **Se debe a que una computadora puede operar con una cantidad finita de dígitos**

**Error de truncamiento:**

- **Representa la diferencia entre una formulación matemática exacta y la aproximación dada por un método numérico. Ej: un desarrollo de Taylor**

# Modelización y Simulación: verificación y validación

---

Hay dos conceptos que son fundamentales a tener en cuenta para chequear un cálculo:

- **Validación**  
**(comprobar que el modelo matemático sea el adecuado, que represente al problema que queremos resolver)**
- **Verificación**  
**(comprobar que estamos resolviendo adecuadamente las ecuaciones planteadas por el modelo matemático, hacer un análisis de sensibilidad)**
- **Siempre hay que analizar que los resultados obtenidos sean razonables, que tengan la simetría del problema, hacer un análisis de sensibilidad de las cond. iniciales, que respete las simetrías y cond. de contorno, que coincida con resultados previos, etc.**

**Toda modelización computacional debería tener un estudio acorde de Validación y Verificación**

---

# Modelado y simulación en Ciencias de Materiales

---

- La norma básica es que **no** existe un sólo modelo o método que nos permita explicar todas las posibles situaciones.
- El punto de partida fundamental es poder individualizar **las escalas de tiempo y distancias importantes para nuestro problema particular:**
  - ¿Con qué detalle necesito describir el material o la situación bajo estudio?
  - ¿Necesito tener en cuenta el aspecto atómico de un material para estudiar la propiedad o fenómeno que me interesa?
  - ¿Es suficiente un cálculo estático o la dinámica es importante?

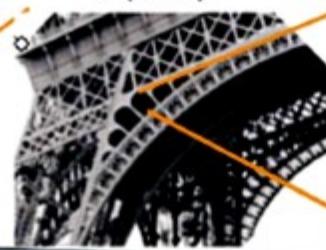
# Modelado y simulación en Ciencias de Materiales

$O(1000 \text{ m})$



Ingeniería estructural a Macroescala

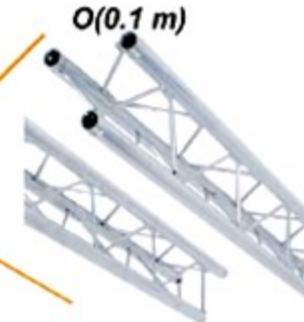
$O(10 \text{ m})$



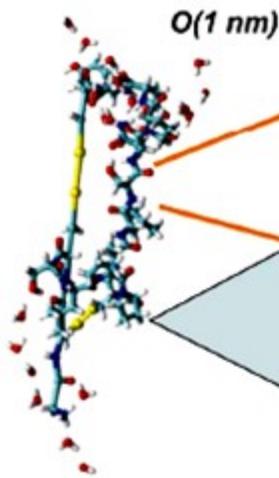
$O(1 \text{ m})$



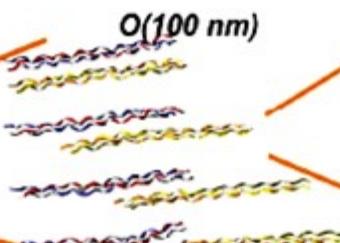
$O(0.1 \text{ m})$



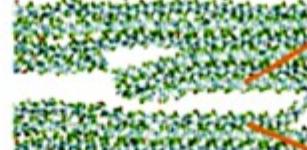
$O(1 \text{ nm})$



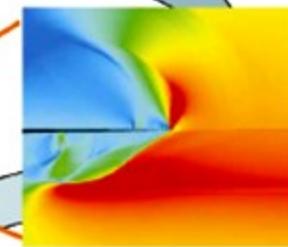
$O(100 \text{ nm})$



$O(1\text{-}6 \text{ m})$



$O(0.01 \text{ m})$



Ingeniería estructural a Ultraescala

# Simulación computacional: herramientas

---

## Hardware / Software

**Hardware:** Componentes físicos del sistema

(todo aquello **tangible**: placa madre, placas de memoria, medios de almacenamiento, medios de impresión, medios de comunicación entre equipos, etc., etc.).

**Software:** Conjunto de instrucciones que le permiten al computador realizar una tarea específica.

(sistemas operativos, lenguajes de programación, bibliotecas gráficas y matemáticas, software específico, etc., etc.)

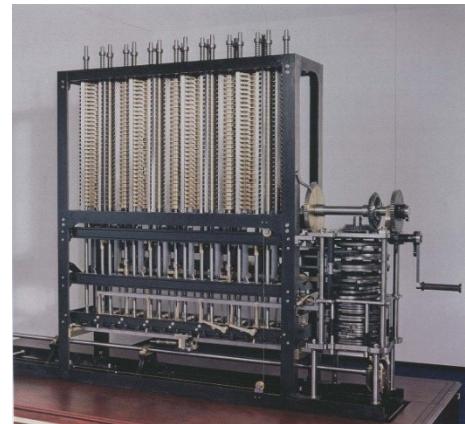
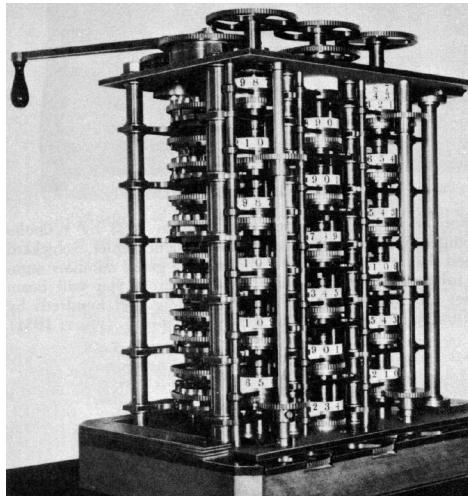
# Simulación computacional: herramientas

---

## Hardware, evolución:

- 1946: Computación manual y mecánica  
**(Babbage-Ada 1821, Hollerith-IBM)**

### Máquinas de Charles Babbage



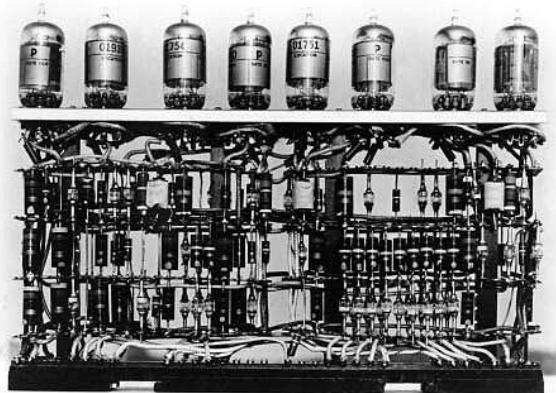
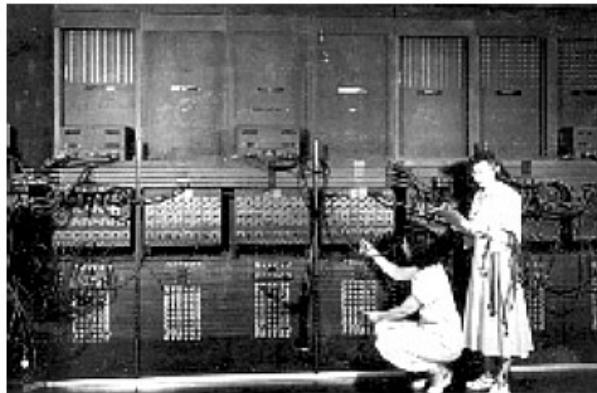
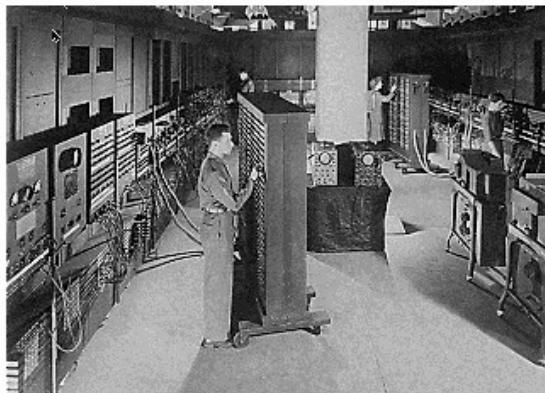
# Simulación computacional: herramientas

---

## Hardware, evolución:

- - 1946: Computación manual y mecánica (Babbage-Ada 1821, Hollerith-IBM)
- 1946 - 1954: Computadoras a válvulas (ENIAC, Von Newmann)

ENIAC



# Simulación computacional: herramientas

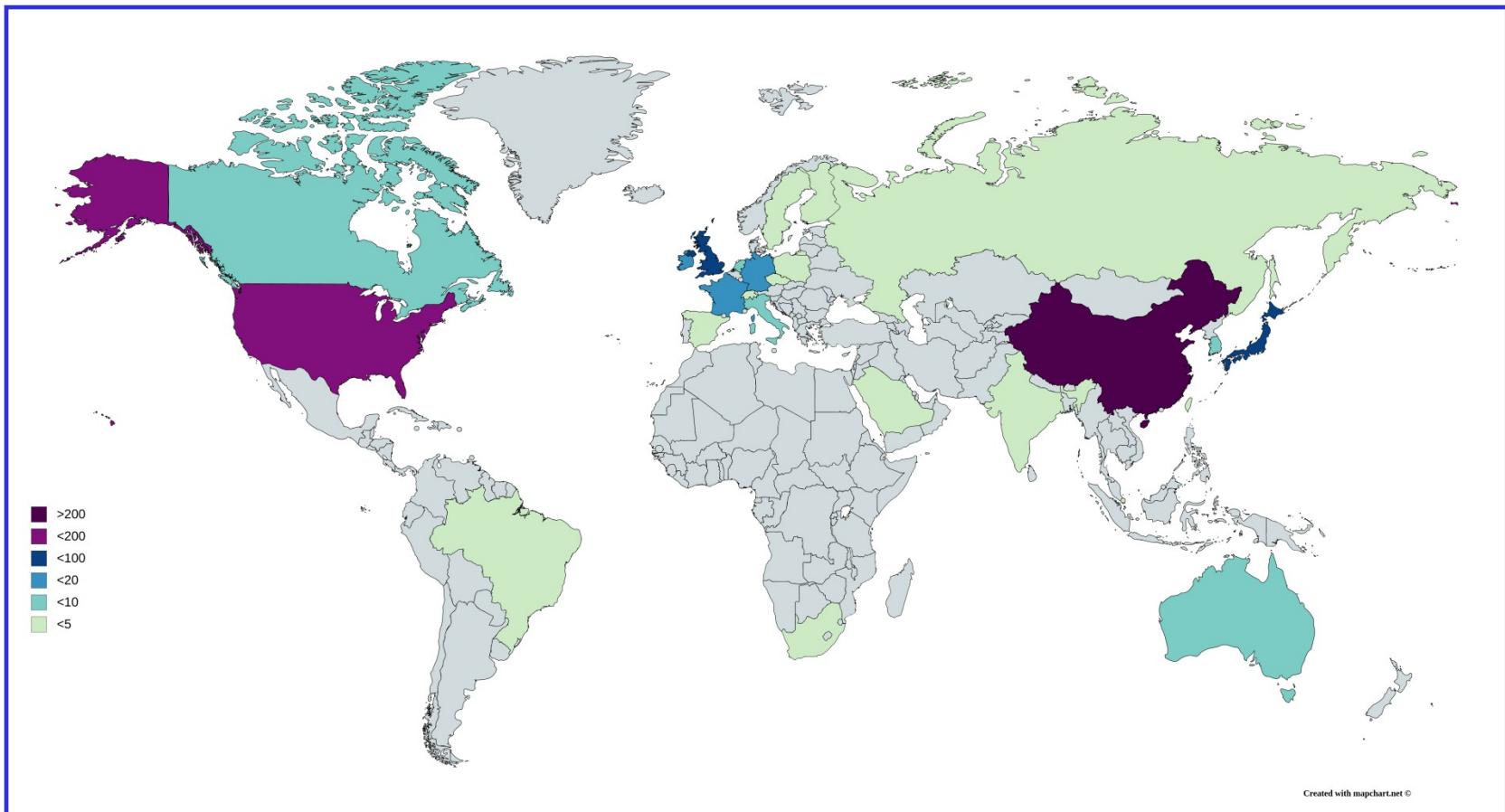
---

## Hardware, evolución:

- - 1946: Computación manual y mecánica  
(Babbage-Ada 1821, Hollerith-IBM)
  - 1946 - 1954: Computadoras a válvulas (ENIAC, Von Newmann)
  - 1954 - 1964: Transistores
  - 1964 - 1976: Circuitos integrados
  - 1976 - 2000: PCs, supercomputadoras, estaciones de trabajo (ALTAIR, Apple, Microsoft)
  - 1995 - presente: computación en paralelo, clusters de PCs
- 1997 - presente: inteligencia artificial, ML, big data

# Hardware: Top500.org

Es un ranking semestral de las computadoras más rápidas del mundo



# Hardware: Top500.org, Noviembre 2024

---

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	El Capitan- HPE Cray EX255a, AMD 4th Gen EPYC 24C 1.8GHz, AMD Instinct MI300A, Slingshot-11, TOSS, HPE DOE/NNSA/LLNL United States	11039616	1742	2746.38	29581
2	Frontier- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Cray OS DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	9066176	1353	2055.72	24607
3	Aurora- HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	9264128	1012	1980.01	38698
4	Eagle- Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Azure Microsoft Azure United States	2073600	561.2	846.84	
5	HPC6- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, RHEL 8.9, HPE Eni S.p.A. Italy	3143520	477.9	606.97	8461
6	Supercomputer Fugaku- Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7630848	442.01	537.21	29899
7	Alps- HPE Cray EX254n, NVIDIA Grace 72C 3.1GHz, NVIDIA GH200 Superchip, Slingshot-11, HPE Cray OS, HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	2121600	434.9	574.84	7124
8	LUMI- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2752704	379.7	531.51	7107
9	Leonardo- BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, NVIDIA HDR100 Infiniband, EVIDEN EuroHPC/CINECA Italy	1824768	241.2	306.31	7494
10	Tuolumne- HPE Cray EX255a, AMD 4th Gen EPYC 24C 1.8GHz, AMD Instinct MI300A, Slingshot-11, TOSS, HPE DOE/NNSA/LLNL United States	1161216	208.1	288.88	3387
11	MareNostrum 5 ACC- BullSequana XH3000, Xeon Platinum 8460Y+ 32C 2.3GHz, NVIDIA H100 64GB, Infiniband NDR, EVIDEN EuroHPC/BSC Spain	663040	175.3	249.44	4159
12	Eos NVIDIA DGX SuperPOD- NVIDIA DGX H100, Xeon Platinum 8480C 56C 3.8GHz, NVIDIA H100, Infiniband NDR400, Nvidia NVIDIA Corporation United States	485888	121.4	188.65	

**Frontier: fue la primera computadora en llegar a los Exaflop!**  
**Ahora están además El Capitán y Aurora**

---

# Hardware: Top500.org, Noviembre 2024

---

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	El Capitán- HPE Cray EX255a, AMD 4th Gen EPYC 24C 1.8GHz, AMD Instinct MI300A, Slingshot-11, TOSS, HPE DOE/NNSA/LLNL United States	11039616	1742	2746.38	29581
2	Frontier- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Cray OS DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	9066176	1353	2055.72	24607
3	Aurora- HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	9264128	1012	1980.01	38698
4	Eagle- Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Azure Microsoft Azure United States	2073600	561.2	846.84	
5	HPC6- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, RHEL 8.9, HPE Eni S.p.A. Italy	3143520	477.9	606.97	8461

**Power:** Potencia en kW para **todo el sistema (compus, AA, etc)**

**Rpeak y Rmax** en PFLOPS (con un programa estándar LINPACK)

**PFLOPS:**  $10^{15}$  operaciones de números reales por segundo

El ranking Green500 muestra GFLOPS por W consumido

El sistema más eficiente es Jedi (Alemania), que está 224 en el Top500.

Su eficiencia es de 72,73 GFlops/Watt.

El Capitán está en el puesto 18 en este ranking.

# Hardware: Top500.org, Noviembre 2024

## Top-5

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	El Capitan- HPE Cray EX255a, AMD 4th Gen EPYC 24C 1.8GHz, AMD Instinct MI300A, Slingshot-11, TOSS, HPE DOE/NNSA/LLNL United States	11039616	1742	2746.38	29581
2	Frontier- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Cray OS DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	9066176	1353	2055.72	24607
3	Aurora- HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	9264128	1012	1980.01	38698
4	Eagle- Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Azure Microsoft Azure United States	2073600	561.2	846.84	
5	HPC6- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, RHEL 8.9, HPE Eni S.p.A. Italy	3143520	477.9	606.97	8461

## Otro ranking: HPCG (para problemas de gradientes conjugados, IA)

Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	HPCG (TFlop/s)
1	6	Supercomputer Fugaku- Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7630848	442.01	16004.5
2	2	Frontier- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Cray OS DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	9066176	1353	14054
3	3	Aurora- HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	9264128	1012	5612.6
4	8	LUMI- HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2752704	379.7	4586.95
5	7	Alps- HPE Cray EX254n, NVIDIA Grace 72C 3.1GHz, NVIDIA GH200 Superchip, Slingshot-11, HPE Cray OS, HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	2121600	434.9	3671.32

# Hardware: Top500.org, Noviembre 2024

---

Countries	Count	System Share (%)	Rmax (GFlops)	Rpeak (GFlops)	Cores
1 United States	173	34.6	6,477,869.130	10,267,226.568	56,856,656
2 China	63	12.6	319,062.154	548,507.445	20,121,848
3 Germany	40	8	399,727.830	577,160.600	4,736,708
4 Japan	34	6.8	940,710.340	1,249,016.118	11,736,944
5 France	24	4.8	298,085.500	431,753.642	4,500,728
6 Italy	14	2.8	849,088.330	1,097,238.408	7,314,432
7 United Kingdom	14	2.8	84,813.684	142,257.324	1,970,096
8 South Korea	13	2.6	213,090.900	286,331.880	2,438,772
9 Netherlands	10	2	98,363.520	169,511.060	899,488
10 Canada	9	1.8	38,930.360	64,416.745	773,504
11 Brazil	9	1.8	67,911.650	122,168.142	874,720
12 Poland	8	1.6	65,751.460	104,597.510	438,944
13 Sweden	8	1.6	63,026.910	89,826.926	472,960
14 Taiwan	7	1.4	103,540.520	151,123.540	712,336
15 Saudi Arabia	7	1.4	96,035.670	153,436.040	2,488,692
16 Russia	6	1.2	71,457.000	98,725.620	721,488
17 India	6	1.2	29,411.690	38,541.096	785,400
18 Norway	6	1.2	23,356.010	37,344.110	492,448
19 Switzerland	5	1	473,517.040	632,909.620	2,732,832
20 Australia	4	0.8	55,227.310	73,106.095	496,032
21 Singapore	4	0.8	23,237.830	37,512.610	280,832
22 Ireland	4	0.8	11,394.210	22,450.170	290,560
23 Spain	3	0.6	221,872.600	306,102.991	1,542,016
24 Czechia	3	0.6	17,991.180	21,784.990	360,192
25 Finland	3	0.6	391,388.310	546,192.585	3,116,992
26 Austria	3	0.6	29,258.378	44,329.088	294,432
27 United Arab Emirates	3	0.6	68,161.000	102,605.583	332,960
28 Thailand	2	0.4	21,996.000	35,449.860	134,656
29 Slovenia	2	0.4	6,918.000	10,047.000	156,480
30 Bulgaria	2	0.4	7,044.870	9,154.160	164,224
31 Turkey	2	0.4	7,366.290	10,100.610	69,760
32 Israel	1	0.2	41,500.000	52,679.020	74,880
33 Hungary	1	0.2	3,105.000	4,508.490	27,776
34 Iceland	1	0.2	10,530.000	17,015.380	36,208
35 Luxembourg	1	0.2	10,520.000	15,288.000	99,200
36 Morocco	1	0.2	3,158.110	5,014.730	71,232
37 Belgium	1	0.2	2,776.000	3,966.560	23,200
38 Argentina	1	0.2	5,390.150	12,582.910	43,008
39 Denmark	1	0.2	66,590.000	100,629.630	223,088
40 Portugal	1	0.2	3,955.500	5,013.500	78,336

# Hardware: Top500.org, Noviembre 2024

---

Countries	Count	System Share (%)	Rmax (GFlops)	Rpeak (GFlops)	Cores
1 United States	173	34.6	6,477,869.130	10,267,226.568	56,856,656
2 China	63	12.6	319,062.154	548,507.445	20,121,848
3 Germany	40	8	399,727.830	577,160.600	4,736,708
4 Japan	34	6.8	940,710.340	1,249,016.118	11,736,944
5 France	24	4.8	298,085.500	431,753.642	4,500,728
6 Italy	14	2.8	849,088.330	1,097,238.408	7,314,432
7 United Kingdom	14	2.8	84,813.684	142,257.324	1,970,096
8 South Korea	13	2.6	213,090.900	286,331.880	2,438,772
9 Netherlands	10	2	98,363.520	169,511.060	899,488
10 Canada	9	1.8	38,930.360	64,416.745	773,504
11 Brazil	9	1.8	67,911.650	122,168.142	874,720
12 Poland	8	1.6	65,751.460	104,597.510	438,944
13 Sweden	8	1.6	63,026.910	89,826.926	472,960
14 Taiwan	7	1.4	103,540.520	151,123.540	712,336
15 Saudi Arabia	7	1.4	96,035.670	153,436.040	2,488,692
16 Russia	6	1.2	71,457.000	98,725.620	721,488
17 India	6	1.2	29,411.690	38,541.096	785,400
18 Norway	6	1.2	23,356.010	37,344.110	492,448
19 Switzerland	5	1	473,517.040	632,909.620	2,732,832
20 Australia	4	0.8	55,227.310	73,106.095	496,032
21 Singapore	4	0.8	23,237.830	37,512.610	280,832
22 Ireland	4	0.8	11,394.210	22,450.170	290,560
23 Spain	3	0.6	221,872.600	306,102.991	1,542,016
24 Czechia	3	0.6	17,991.180	21,784.990	360,192
25 Finland	3	0.6	391,388.310	546,192.585	3,116,992
26 Austria	3	0.6	29,258.378	44,329.088	294,432
27 United Arab Emirates	3	0.6	68,161.000	102,605.583	332,960
28 Thailand	2	0.4	21,996.000	35,449.860	134,656
29 Slovenia	2	0.4	6,918.000	10,047.000	156,480
30 Bulgaria	2	0.4	7,044.870	9,154.160	164,224
31 Turkey	2	0.4	7,366.290	10,100.610	69,760
32 Israel	1	0.2	41,500.000	52,679.020	74,880
33 Hungary	1	0.2	3,105.000	4,508.490	27,776
34 Iceland	1	0.2	10,530.000	17,015.380	36,208
35 Luxembourg	1	0.2	10,520.000	15,288.000	99,200
36 Morocco	1	0.2	3,158.110	5,014.730	71,232
37 Belgium	1	0.2	2,776.000	3,966.560	23,200
38 Argentina	1	0.2	5,390.150	12,582.910	43,008
39 Denmark	1	0.2	66,590.000	100,629.630	223,088
40 Portugal	1	0.2	3,955.500	5,013.500	78,336

# Hardware: Top500.org

---



“El Cap” has 11,039,616 combined CPU and GPU cores and is based on AMD 4th generation EPYC processors with 24 cores at 1.8GHz and AMD Instinct MI300A accelerators. The system uses the Cray Slingshot 11 fabric and has an energy efficiency of 58.89 Gigaflops/watt, placing it at no. 18 on the Green500 list. AMD said the system is powered by AMD Instinct MI300A APUs, which puts CPU and GPU cores and stacked memory into a single package.

# Hardware: top500 y tendencias

---

- Sistemas **multicore** en grandes clusters
- **Computacion paralela**
- Utilización de unidades de procesamiento grafico (**GPU**)



## NVIDIA TESLA GPU COMPUTING SOLUTIONS FOR WORKSTATIONS

Experience cluster level computing performance—up to 250 times faster than standard PCs and workstations—right at your desk. Convert your workstation into a NVIDIA® Tesla™ Personal Supercomputer by adding Tesla GPU computing processors. Each Tesla GPU is based on the revolutionary NVIDIA® CUDA™ massively parallel computing architecture with a rich set of developer tools (compilers, profilers, debuggers) for popular programming languages APIs like C, C++, Fortran, and driver APIs like OpenCL and DirectCompute.



## SUPERCOMPUTING PERFORMANCE

- Revolutionary CUDA Architecture
- 1000+ cores, massively parallel processing
- 250x the compute performance of a PC

# Supercómputo en Argentina: SNCAD



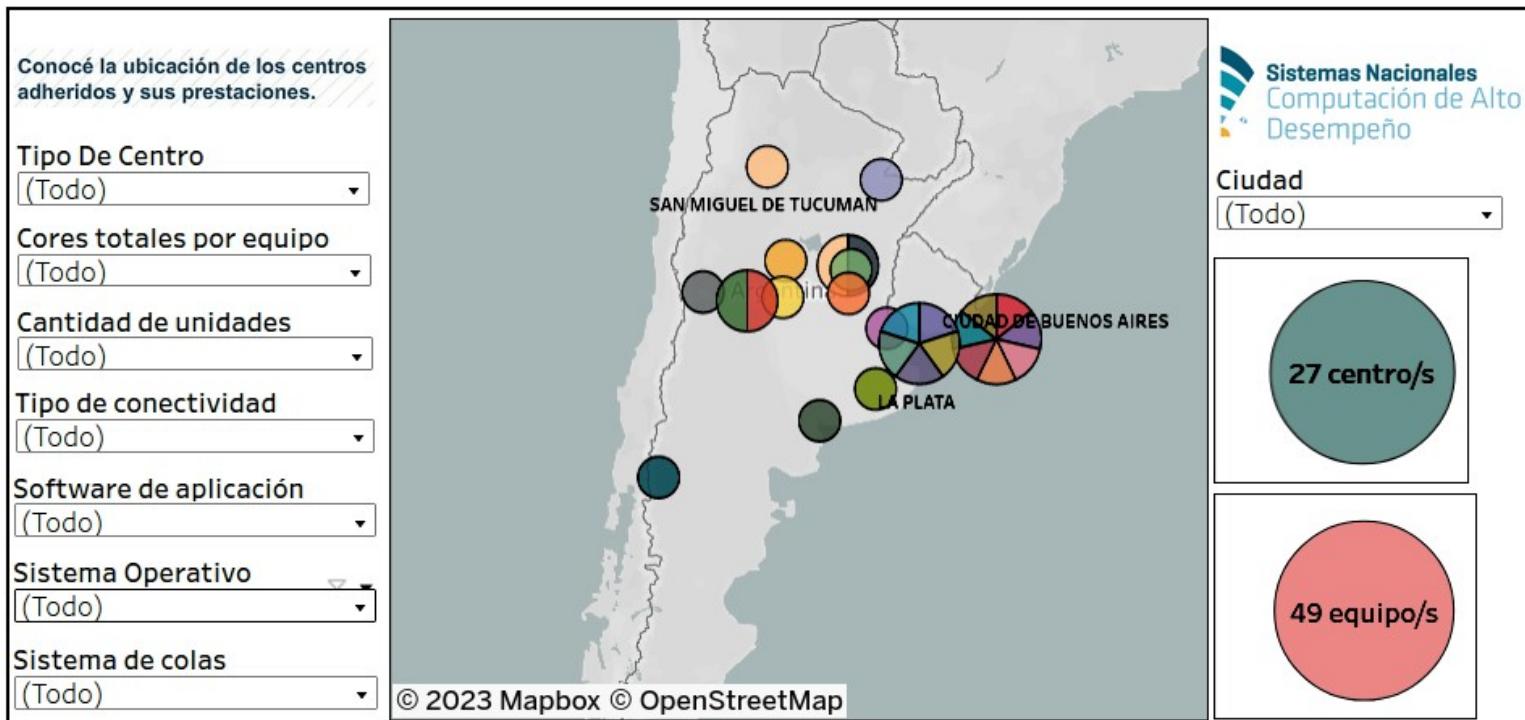
ID	Tipo de Centro	Institución	Provincia	Ciudad	E-Mail	Web	Teléfono
302	De Cálculo	Instituto de Astronomía y Física del Espacio (UBA_CONICET)	Ciudad de Buenos Aires	Ciudad de Buenos Aires	gdubner@iafe.uba.ar	<a href="http://www.iafe.uba.ar/HOPE">http://www.iafe.uba.ar/HOPE</a>	(011) 4788-1916
310	De cálculo	Centro de Investigaciones del Mar y la Atmósfera (UBA-CONICET)	Ciudad de Buenos Aires	Ciudad de Buenos Aires	director@cima.fcen.uba.ar	<a href="http://www.cima.fcen.uba.ar">http://www.cima.fcen.uba.ar</a>	(011) 4787-2693
341	De cálculo	Ceconea (UNNE)	Corrientes	Corrientes	ceconeaa@gmail.com	<a href="http://gica.exa.unne.edu.ar">http://gica.exa.unne.edu.ar</a>	(0379) 447-3931 (int 132)
352	De cálculo	GFC/GEMA (UNLP)	Buenos Aires	La Plata	gfc@ing.unlp.edu.ar	<a href="http://gtc.ing.unlp.edu.ar">http://gtc.ing.unlp.edu.ar</a>	(0221) 423-6679 (int 146)
390	De Cálculo	Facultad de Ciencias Físico, Matemáticas y Naturales (LIDIC)	San Luis	San Luis	mprinti@unsl.edu.ar	<a href="http://www.lidic.unsl.edu.ar">http://www.lidic.unsl.edu.ar</a>	(0226) 442-0823
396	De cálculo	UnCaFIQT--Unidad de Cálculo para Física y Química Teórica (UNLP-CONICET)	Buenos Aires	La Plata	calculo@inifta.unlp.edu.ar	<a href="http://calculo.inifta.unlp.edu.ar">http://calculo.inifta.unlp.edu.ar</a>	(0221) 421-7430
456	De Cálculo	Instituto de Genética Veterinaria (IGEVET), CCT La Plata CONICET - Facultad de Ciencias Veterinarias (UNLP).	Buenos Aires	La Plata	igevet.secretaria@fcv.unlp.edu.ar	<a href="http://igevet.fcv.unlp.edu.ar">http://igevet.fcv.unlp.edu.ar</a>	(0221) 4211-799
540	De cálculo	Cluster ICB-ITIC. Mendoza	Mendoza	Mendoza	ebringa@yahoo.com	<a href="http://itic.uncu.edu.ar/formulario_solicitud.pdf">http://itic.uncu.edu.ar/formulario_solicitud.pdf</a>	(261) 423-6003
635	De cálculo	Centro de Investigación de Métodos Computacionales CIMEC.Universidad Nacional del Litoral (CONICET)	Santa Fe	Santa Fe	cardona.alberto@gmail.com	<a href="http://www.cimec.santafe-conicet.gov.ar/">http://www.cimec.santafe-conicet.gov.ar/</a>	(0342)-4511594
672	De cálculo	/ Sistemas Biológicos IFLYSIB (CONICET)- Departamento de Qu	Buenos Aires	La Plata	manuel@iflysisb.unlp.edu.ar	<a href="http://iflysisb.unlp.edu.ar">http://iflysisb.unlp.edu.ar</a>	(0221)-425-4904
350	Grid	Centro de Cálculo de Alto Desempeño (UNRC)	Córdoba	Río Cuarto	dbellomo@uti.unrc.edu.ar	<a href="http://www.unrc.edu.ar">www.unrc.edu.ar</a>	(0358) 467-6183
498	Grid	Instituto de Investigación en Informática (LIDI)	Buenos Aires	La Plata	degusti@lidi.info.unlp.edu.ar		(0221) 422-7707
303	Integral	Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEyN-UBA)	Ciudad de Buenos Aires	Ciudad de Buenos Aires	decano@fcen.uba.ar	<a href="http://cecarr.fcen.uba.ar/formulario.php">http://cecarr.fcen.uba.ar/formulario.php</a>	(011) 4576-3390 (int 709)
305	Integral	HPC Cluster Rosario (CONICET)	Santa Fe	Rosario	administrador@cluster.rosarioconicet.gov.ar	<a href="http://cluster.rosarioconicet.gov.ar/index.php">http://cluster.rosarioconicet.gov.ar/index.php</a>	(0341) 482-1771 (int 133-153)
311	Integral	Centro de Cálculo Alto Desempeño (UNC)	Córdoba	Córdoba	director@ccad.unc.edu.ar/servicios/	<a href="http://ccad.unc.edu.ar">http://ccad.unc.edu.ar</a>	(0351) 433-3046
387	Integral	GTIC (CNEA)	Buenos Aires	General San Martín	robevi@cnea.gov.ar	<a href="http://www.cnea.gov.ar">http://www.cnea.gov.ar</a>	(011) 6772-7031/7341

# Supercómputo en Argentina: SNCAD



<https://www.argentina.gob.ar/ciencia/sistemasnacionales/computacion-de-alto-desempeno/ipac/mapa>

## Mapa de equipamiento disponible



# Supercómputo en Argentina: SNCAD

---



## Computadoras históricas en Argentina

Año	Nombre	Modelo	Rpeak	Rpeak_min	%Rpeak_min
1962	Clementina	Ferranti Mercury	5 KFLOPS	—	—
2/2000	Clementina 2	SGI Origin 2000 (40 cores)	24 GFLOPS	35 GFLOPS	68%
2/2001	Deepblue 2	16×2×Pentium II	25 GFLOPS	62 GFLOPS	40%
2/2009	Cristina	70×2×Xeon 5420	5.6 TFLOPS	23 TFLOPS	24%
6/2010	ISAAC	144×Xeon X3220	5 TFLOPS	28 TFLOPS	18%
6/2014	Mendieta (fase 2)	14×2×Xeon 2680v2 + 12×m2090 + 8×K20	23 TFLOPS	145 TFLOPS	16%
10/2015	TUPAC	72×4×Opteron 6276	42 TFLOPS	181 TFLOPS	23%
6/2019	Huara Muyu	128×2×Xeon 6142	370 TFLOPS	1164 TFLOPS	31%
8/2021	Serafín	60×2×EPYC 7532	147 TFLOPS	1792 TFLOPS	8.2%

(Rpeak\_min es lo mínimo para entrar al top500 cuando se inauguró)

---

# Supercómputo en Argentina

---

[Home](#) » [Servicio Meteorológico Nacional](#) » **CLEMENTINA XXI - THINKSYSTEM SD650-I V3, Xeon Max 9462 32C 2....**

## CLEMENTINA XXI - THINKSYSTEM SD650-I V3, XEON MAX 9462 32C 2.7GHZ, INFINIBAND NDR, INTEL GPU MAX 1550, RHEL

**Site:** Servicio Meteorológico Nacional

**System URL:** <https://www.smn.gob.ar/>

**Manufacturer:** Lenovo

**Cores:** 43,008

**Processor:** Xeon Max 9462 32C 2.7GHz

**Interconnect:** Infiniband NDR

**Installation Year:** 2023

### Performance

**Linpack Performance (Rmax)** 5.39 PFlop/s

**Theoretical Peak (Rpeak)** 12.58 PFlop/s

**Nmax** 1,869,696

### Software

**Operating System:** Red Hat Enterprise Linux

**Compiler:** Intel oneAPI 2024.2.1

**Math Library:** Intel MKL 2024.2

**MPI:** Intel MPI 2021.13

# Supercómputo en Argentina

Home » Servicio Meteorológico Nacional » Clementina XXI - ThinkSystem SD650-I V3, Xeon Max 9462 32C 2....

## CLEMENTINA XXI - THINKSYSTEM SD650-I V3, XEON MAX 9462 32C 2.7GHZ, INFINIBAND NDR, INTEL GPU MAX 1550, RHEL

**Site:** Servicio Meteorológico Nacional

**System URL:** <https://www.smn.gob.ar/>

**Manufacturer:** Lenovo

**Cores:** 43,008

**Processor:** Xeon Max 9462 32C 2.7GHz

**Interconnect:** Infiniband NDR

**Installation Year:** 2023

### Performance

**Linpack Performance (Rmax)** 5.39 PFlop/s

**Theoretical Peak (Rpeak)** 12.58 PFlop/s

**Nmax** 1,869,696

### Software

**Operating System:** Red Hat Enterprise Linux

**Compiler:** Intel oneAPI 2024.2.1

**Math Library:** Intel MKL 2024.2

**MPI:** Intel MPI 2021.13

## Iniciativa de Proyectos Acelerados de Cálculo (IPAC)

Compartir en  
redes sociales



### Objetivos

- ✓ Facilitar el acceso abierto competitivo para todo el Sistema Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación (SNCTI) a los recursos computacionales a gran escala de la supercomputadora Clementina XXI.
- ✓ Contribuir a la producción de nuevos conocimientos, la realización de nuevas interpretaciones científicas y la resolución de problemas tecnológicos; favorecer el desarrollo de la comunidad de usuarios de supercálculo a nivel federal y optimizar la utilización de los recursos.

### Características de los proyectos

Se otorgarán horas de cómputo para la ejecución de proyectos en las siguientes categorías:

1. Hasta 10 Proyectos de Avances Decisivos con Supercómputo (PADS), de hasta 4.000.000 de horas de CPU y/o 250.000 h GPU.
2. Hasta 40 Proyectos de Cálculo Intensivo (PCI), de hasta 1.000.000 de horas de CPU y/o 60.000 h GPU.
3. Hasta 60 Proyectos de Iniciación en Supercómputo en Argentina (PISCA), de hasta 100.000 de horas de CPU y/o 1.000 h GPU.

**Convocatoria 2024:** recepción de propuestas hasta el 15 de febrero de 2025 inclusive.

# Simulación computacional: herramientas

---

## Software

- Paquetes (ABAQUS, COMSOL, Wien2k, VASP, SIESTA, Abinit, Q-Expresso, GROMACS, LAMMPS, NAMD, etc)  
Muchos códigos son específicos para un problema determinado (datos y materiales), están **validados**.
- Programas propios  
**cada opción tiene sus pros y sus contras!!!**

Sistemas operativos (gestor y organizador de todas las tareas que realiza el computador)

- UNIX, Linux (Fedora, Ubuntu), MAC OS
- Windows

Lenguajes de programación (traducen las instrucciones del modelo matemático al lenguaje de máquina)

- C, C++, Fortran
- Matlab, Python, R, Julia / notebooks (Jupyter y sim)

# Simulación computacional: software

---

## Software de uso general

- Planillas de cálculo / Procesadores de texto
- Procesamiento de imágenes
- Diseño asistido por computadoras (CAD)

## Bibliotecas de cálculo numérico

- IMSL (International Mathematics and Statistical Library)
- BLAS (Basic Linear Algebra)  
LAPACK (Linear Algebra Package) / SCALAPACK
- Librerías Python: NumPy, SciPy, matplotlib, etc.
- Bibliotecas de IA: TensorFlow, Keras, Scikit-Learn

## Métodos de paralelización

- MPI (Message Passing Interface)
- OpenMP (Open Multi Processing)

# Simulación computacional: otros métodos

---

Otros métodos de computación paralelo: computación en GRID y voluntaria.

**Computación voluntaria: computación en máquinas personales cuando estas no están activas (como salvapantallas).  
(para problemas muy muy difíciles!!)**

Project	Launched	Home	Category	Research focus	Active units	Performance TeraFLOPS
Folding@home	2000	Stanford University	Molecular biology	Understand protein folding, misfolding, and related diseases	170755	39673
Milkyway@home	2007	Rensselaer Polytechnic Institute	Astronomy	Create a highly accurate three-dimensional model of the Milky Way galaxy	338000	1175
Einstein@home	2005	University of Wisconsin	Astrophysics	Search for pulsars using radio signals and gravitational wave data	5375352	1138
Collatz Conjecture	2009	Private	Mathematics	Study the Collatz conjecture, an unsolved conjecture in mathematics	10089	623
SETI@home	1999	University of California, Berkeley	Astrobiology	Search for extraterrestrial life	225534	593
Great Internet Mersenne Prime Search	1996	Private	Mathematics	Searches for Mersenne primes of world record size	1256427	174
Asteroids@home	2012	Charles University in Prague	Astrophysics	To significantly enlarge our knowledge of the physical properties of asteroids		135
POEM@Home	2007	University of Karlsruhe, Germany	Molecular biology	Protein structure prediction	9662	107
Rosetta@home	2005	University of Washington	Molecular biology	Protein structure prediction for disease research	59677	58
theSkyNet	2011	International Centre for Radio Astronomy Research	Astronomy	Analysis of radio astronomy data	18859	46
Climateprediction.net	2003	Oxford Universityç	Climate study	Analyse ways to improve climate prediction models	27158	34

# Simulación computacional: otros métodos

## COVID-19: THE CORONAVIRUS OUTBREAK AND IT



DATA ANALYTICS AND DATA MANAGEMENT > BIG DATA

## Distributed Computing Can Contribute to COVID-19 Cures

Much of modern research depends on computing power -- and crowd-sourced distributed computing projects can help. Read on for the distributed efforts any IT pro can support in fighting COVID-19.

Christine Hall | Jun 05, 2020

world community grid

Research About | News | Community | My Contribution

Research: OpenPandemics - COVID-19: Project Overview

### OpenPandemics - COVID-19

COVID-19 is a disease caused by SARS-CoV2, a virus of the coronavirus family. These viruses cause diseases that affect mainly the human respiratory system and potentially other major organs. COVID-19 can lead to serious illness or even death. You and your computer can help scientists at Scripps Research find potential treatments.

Contribute to this Project

A collage of scientific icons including a DNA helix, test tubes, and a molecular structure.

## CITIZEN SCIENTISTS CREATE AN EXASCALE COMPUTER TO COMBAT COVID-19

July 26, 2020  
by Anton Thynell

FOLDING  
@HOME

Maxwell I Zimmerman, Justin R Porter, Michael D Ward, Sukrit Singh, Neha Vithani, Artur Meller, Upasana L Mallimadugula, Catherine E Kuhn, Jonathan H Borowsky, Rafal P Wiewiora, Matthew F D Hurley, Aoife M Harbison, Carl A Fogarty, Joseph E Coffland, Elisa Fadda, Vincent A Voelz, John D Chodera, Gregory R Bowman

- PMID: [32637963](#)
- PMCID: [PMC7337393](#)
- DOI: [10.1101/2020.06.27.175430](#)
- <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2020.06.27.175430v1>

# Simulación computacional: pandemia

## Modelización epidemiológica

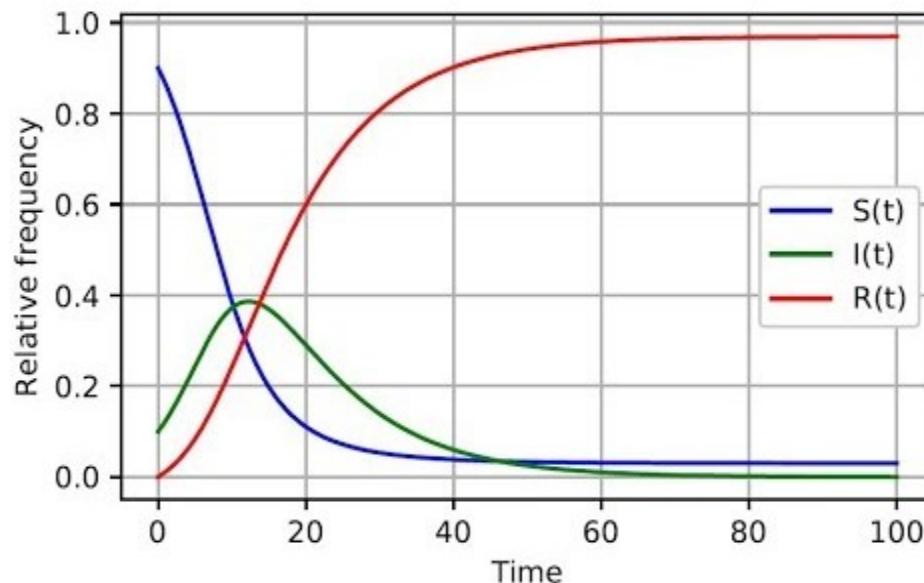
Hay muchos modelos y variaciones.  
El más común, para empezar, es el modelo SIR



$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\beta IS}{N}$$

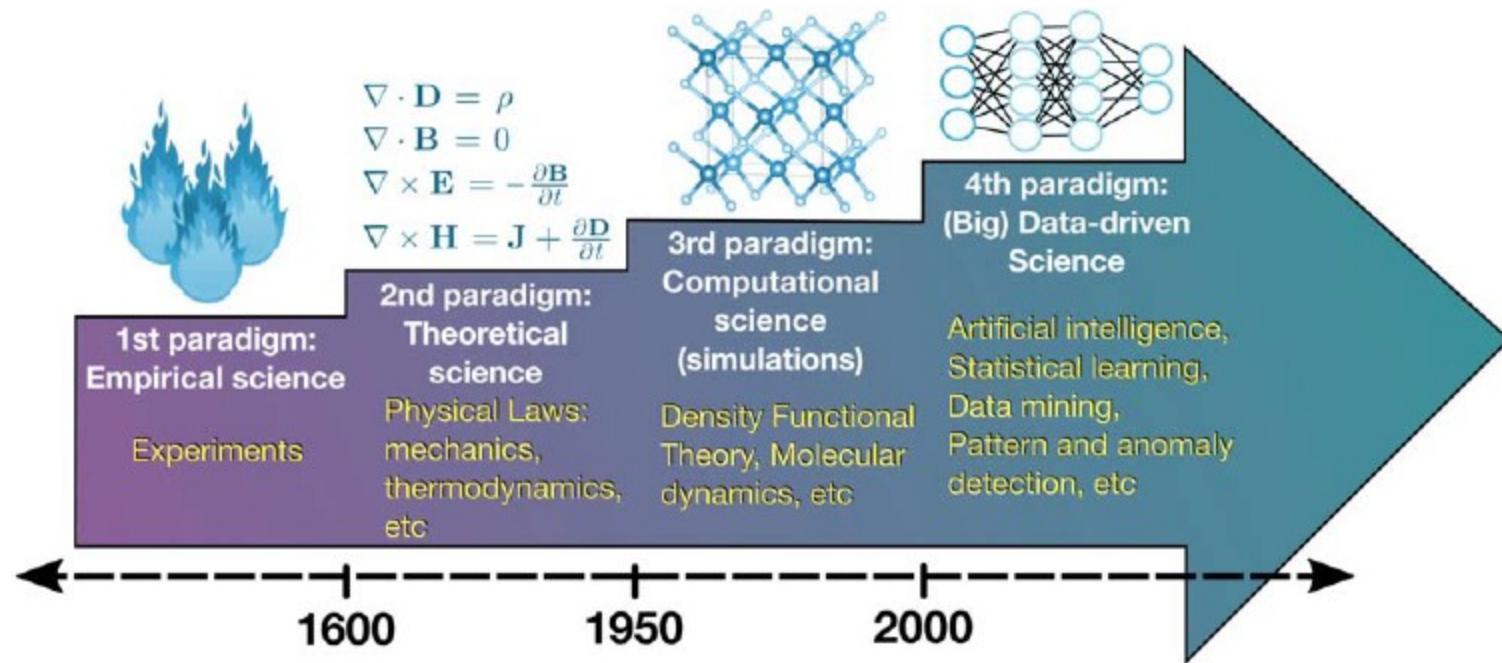
$$\frac{dI}{dt} = \frac{\beta IS}{N} - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$



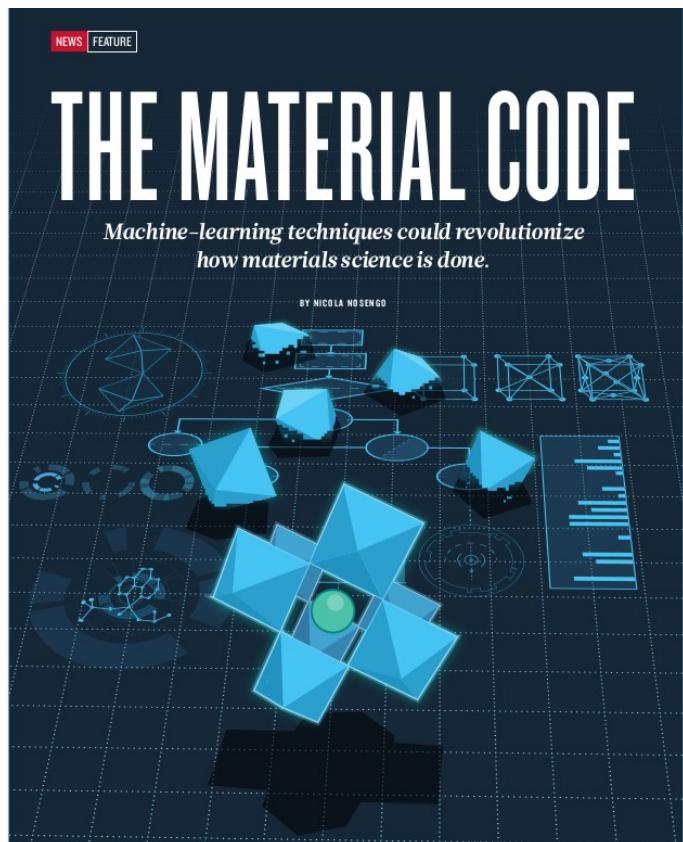
# Nuevas herramientas: bases de datos, ML, IA

Desarrollo de bases de datos que recaban información de cálculos previos, para ser utilizados en *data mining* (con uso de inteligencia artificial)



# Nuevas Herramientas: Bases de Datos Globales

Bases de datos que recaban información de cálculos previos, para ser utilizados en búsquedas globales (con uso de inteligencia artificial)

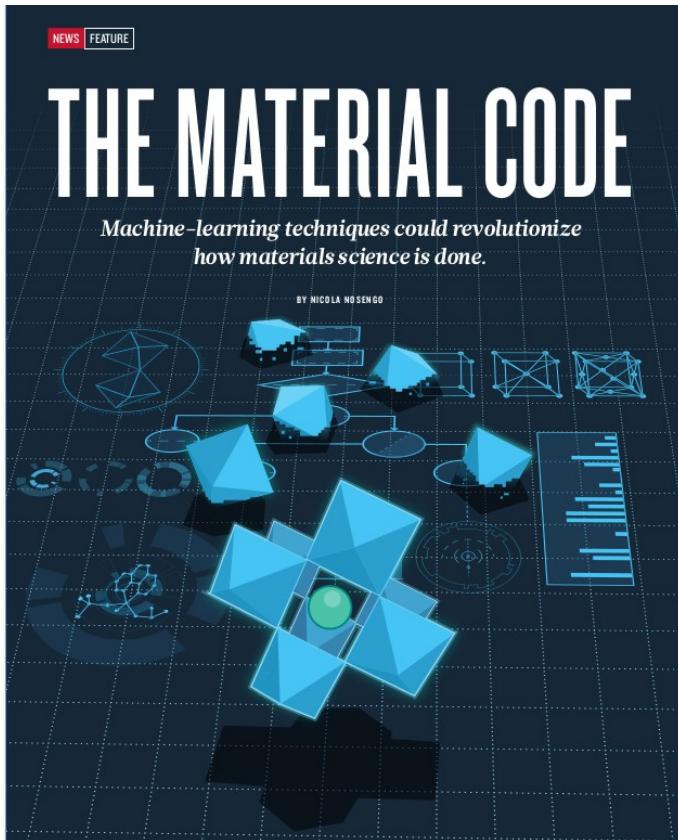


The homepage of The Materials Project. At the top, there is a navigation bar with links for Home, About, Apps, Documentation, API, and Login. The main header features the project's logo, which is a stylized hexagonal lattice pattern. Below the logo, three small icons represent different data types: a network graph, a crystal structure, and a 3D cube. The main title 'The Materials Project' is centered in large white letters. To the right, a descriptive text block states: 'Harnessing the power of supercomputing and state of the art electronic structure methods, the Materials Project provides open web-based access to computed information on known and predicted materials as well as powerful analysis tools to inspire and design novel materials.' Below this text are three calls-to-action: 'Learn more', 'Tutorials', and 'Sign In or Register'.

The homepage of AFLOW. The background features a light blue gradient with a complex network of interconnected spheres and lines, representing a molecular structure. The title 'AFLOW' is in large blue letters, with the subtitle 'Automatic - FLOW for Materials Discovery' in smaller text below it. A horizontal menu bar includes links for HOME, CONSORTIUM, PUBLICATIONS, FORUM, SRC, and SEARCH. A welcome message at the bottom left says: 'Welcome to the AFLOW distributed materials property repository: share with us your passion for innovation and technology.' Below this, a text block states: 'Aflow is a globally available database of **1.859.011** material compounds - with over **184.042.089** calculated properties (and growing).'

# Nuevas Herramientas: Bases de Datos Globales

Bases de datos que recaban información de cálculos previos, para ser utilizados en búsquedas globales (con uso de inteligencia artificial)



 **AiiDA**  
Automated Interactive Infrastructure and Database for Computational Science

AiiDA is a flexible and scalable informatics' infrastructure to manage, preserve, and disseminate the simulations, data, and workflows of modern-day computational science. Able to store the full provenance of each object, and based on a tailored database built for efficient data mining of heterogeneous results, AiiDA gives the user the ability to interact seamlessly with any number of remote HPC resources and codes, thanks to its flexible plugin interface and workflow engine for the automation of complex sequences of simulations.

**OQMD:**  
*The Open Quantum Materials Database*

## Welcome to the Open Quantum Materials Database

The OQMD is a database of DFT-calculated thermodynamic and structural properties. This online interface is for convenient, small-scale access; for a more powerful utilization of the data, we recommend downloading the entire database and the API for interfacing with it, from the link below.

## ARTICLES

<https://doi.org/10.1038/s41565-017-0035-5>

nature  
nanotechnology

# Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds

Two-dimensional (2D) materials have emerged as promising candidates for next-generation electronic and optoelectronic applications. Yet, only a few dozen 2D materials have been successfully synthesized or exfoliated. Here, we search for 2D materials that can be easily exfoliated from their parent compounds. Starting from 108,423 unique, experimentally known 3D compounds, we identify a subset of 5,619 compounds that appear layered according to robust geometric and bonding criteria. High-throughput calculations using van der Waals density functional theory, validated against experimental structural data and calculated random phase approximation binding energies, further allowed the identification of 1,825 compounds that are either easily or potentially exfoliable. In particular, the subset of 1,036 easily exfoliable cases provides novel structural prototypes and simple ternary compounds as well as a large portfolio of materials to search from for optimal properties. For a subset of 258 compounds, we explore vibrational, electronic, magnetic and topological properties, identifying 56 ferromagnetic and antiferromagnetic systems, including half-metals and half-semiconductors.

246

NATURE NANOTECHNOLOGY | VOL 13 | MARCH 2018 | 246–252 | [www.nature.com/naturenanotechnology](http://www.nature.com/naturenanotechnology)

## REVIEW

<https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>

# Machine learning for molecular and materials science

Keith T. Butler<sup>1</sup>, Daniel W. Davies<sup>2</sup>, Hugh Cartwright<sup>3</sup>, Olexandr Isayev<sup>4\*</sup> & Aron Walsh<sup>5,6\*</sup>

Here we summarize recent progress in machine learning for the chemical sciences. We outline machine-learning techniques that are suitable for addressing research questions in this domain, as well as future directions for the field. We envisage a future in which the design, synthesis, characterization and application of molecules and materials is accelerated by artificial intelligence.

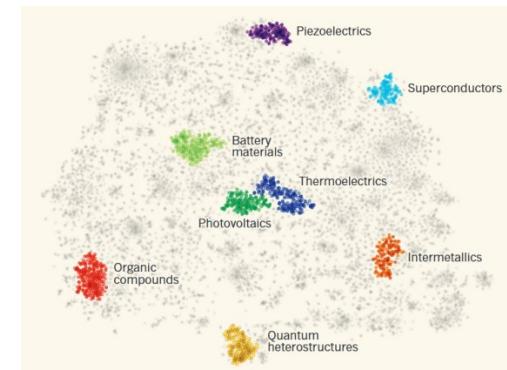
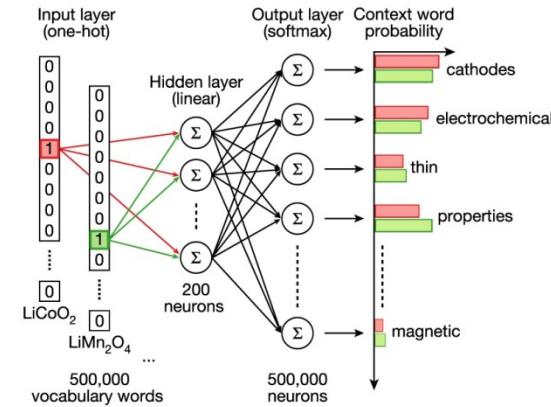
26 JULY 2018 | VOL 559 | NATURE | 547

## Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature

Vahe Tshitoyan<sup>1,3\*</sup>, John Dagdelen<sup>1,2</sup>, Leigh Weston<sup>1</sup>, Alexander Dunn<sup>1,2</sup>, Ziqin Rong<sup>1</sup>, Olga Kononova<sup>2</sup>, Kristin A. Persson<sup>1,2</sup>, Gerbrand Ceder<sup>1,2,\*</sup> & Anubhav Jain<sup>1\*</sup>

4 JULY 2019 | VOL 571 | NATURE | 95

The overwhelming majority of scientific knowledge is published as text, which is difficult to analyse by either traditional statistical analysis or modern machine learning methods. By contrast, the main source of machine-interpretable data for the materials research community has come from structured property databases<sup>1,2</sup>, which encompass only a small fraction of the knowledge present in the research literature. Beyond property values, publications contain valuable knowledge regarding the connections and relationships between data items as interpreted by the authors. To improve the identification and use of this knowledge, several studies have focused on the retrieval of information from scientific literature using supervised natural language processing<sup>3–10</sup>, which requires large hand-labelled datasets for training. Here we show that materials science knowledge present in the published literature can be efficiently encoded as information-dense word embeddings<sup>11–13</sup> (vector representations of words) without human labelling or supervision. Without any explicit insertion of chemical knowledge, these embeddings capture complex materials science concepts such as the underlying structure of the periodic table and structure–property relationships in materials. Furthermore, we demonstrate that an unsupervised method can recommend materials for functional applications several years before their discovery. This suggests that latent knowledge regarding future discoveries is to a large extent embedded in past publications. Our findings highlight the possibility of extracting knowledge and relationships from the massive body of scientific literature in a collective manner, and point towards a generalized approach to the mining of scientific literature.



# IA en Ciencia de Materiales (Word2Vec)

---

## Discovering Physical Concepts with Neural Networks

Raban Iten, Tony Metger, Henrik Wilming, Lídia del Rio, and Renato Renner

Phys. Rev. Lett. **124**, 010508 – Published 8 January 2020

 Physics See Viewpoint: Physics Insights from Neural Networks

### ABSTRACT

Despite the success of neural networks at solving concrete physics problems, their use as a general-purpose tool for scientific discovery is still in its infancy. Here, we approach this problem by modeling a neural network architecture after the human physical reasoning process, which has similarities to representation learning. This allows us to make progress towards the long-term goal of machine-assisted scientific discovery from experimental data without making prior assumptions about the system. We apply this method to toy examples and show that the network finds the physically relevant parameters, exploits conservation laws to make predictions, and can help to gain conceptual insights, e.g., Copernicus' conclusion that the solar system is heliocentric.

# Nuevos resultados (DeepMind)

---

## Mastering the game of Go without human knowledge

David Silver<sup>1\*</sup>, Julian Schrittwieser<sup>1\*</sup>, Karen Simonyan<sup>1\*</sup>, Ioannis Antonoglou<sup>1</sup>, Aja Huang<sup>1</sup>, Arthur Guez<sup>1</sup>, Thomas Hubert<sup>1</sup>, Lucas Baker<sup>1</sup>, Matthew Lai<sup>1</sup>, Adrian Bolton<sup>1</sup>, Yutian Chen<sup>1</sup>, Timothy Lillicrap<sup>1</sup>, Fan Hui<sup>1</sup>, Laurent Sifre<sup>1</sup>, George van den Driessche<sup>1</sup>, Thore Graepel<sup>1</sup> & Demis Hassabis<sup>1</sup>

354 | NATURE | VOL 550 | 19 OCTOBER 2017

A long-standing goal of artificial intelligence is an algorithm that learns, *tabula rasa*, superhuman proficiency in challenging domains. Recently, AlphaGo became the first program to defeat a world champion in the game of Go. The tree search in AlphaGo evaluated positions and selected moves using deep neural networks. These neural networks were trained by supervised learning from human expert moves, and by reinforcement learning from self-play. Here we introduce an algorithm based solely on reinforcement learning, without human data, guidance or domain knowledge beyond game rules. AlphaGo becomes its own teacher: a neural network is trained to predict AlphaGo's own move selections and also the winner of AlphaGo's games. This neural network improves the strength of the tree search, resulting in higher quality move selection and stronger self-play in the next iteration. Starting *tabula rasa*, our new program AlphaGo Zero achieved superhuman performance, winning 100–0 against the previously published, champion-defeating AlphaGo.

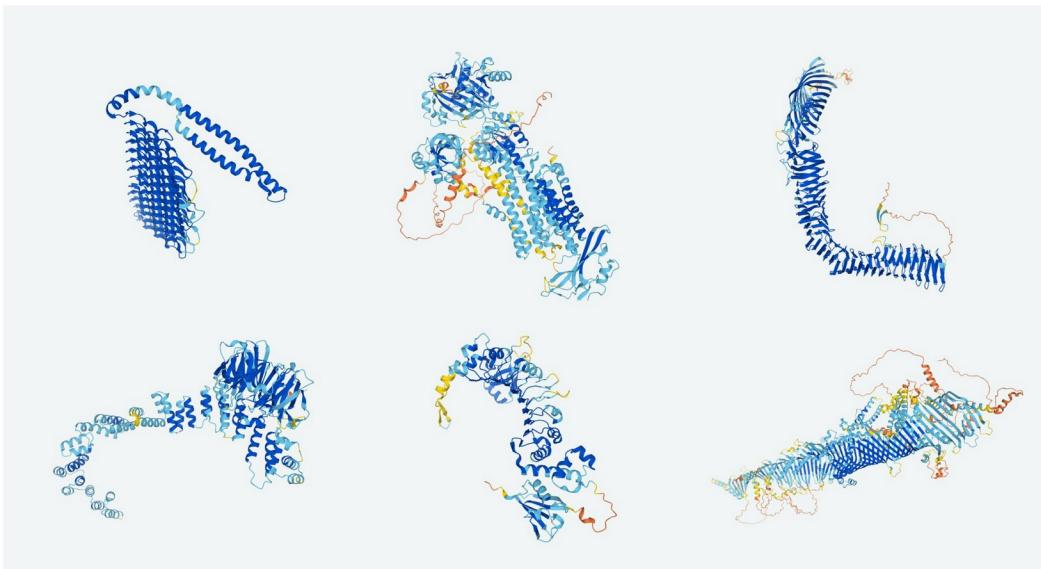
<http://www.deeplearning.com>)

# Nuevos resultados (DeepMind)

GOOGLE DEEPMIND >

## La inteligencia artificial revela la forma de los ladrillos básicos de la vida y abre una nueva era en la ciencia

DeepMind, una empresa comprada por Google, predice con una precisión sin precedentes la estructura de casi todas las proteínas que forman un ser humano



Ver “El País”, 22/07/2021 y  
<http://www.deeplearning.com>)

O en un Tweet:

Jorge Carrión @jorgecarrión21 · 22 jul.

...

De AlphaGo a AlphaFold, de jugar al go a predecir todas las estructuras de las proteínas: Deepmind ha hecho hoy la mayor aportación de la historia de la inteligencia artificial al conocimiento científico. ¡Madre mía!

# Nuevos resultados (DeepMind)

---

## 'THE ENTIRE PROTEIN UNIVERSE': AI PREDICTS SHAPE OF NEARLY EVERY KNOWN PROTEIN

DeepMind's AlphaFold tool has determined around 200 million protein structures, which are now available to scientists in a database.

By Ewen Callaway

**D**etermining the 3D shape of almost any protein known to science is now as simple as typing in a Google search. Researchers have used AlphaFold – the revolutionary artificial-intelligence (AI) network – to predict the structures of more than 200 million proteins from some 1 million species, covering almost every known protein on the planet.

On 28 July, the data dump was made

available for free in a database set up by DeepMind – the London-based AI company, owned by Google, that developed AlphaFold – and the European Molecular Biology Laboratory's European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI), an intergovernmental organization near Cambridge, UK.

"Essentially you can think of it covering the entire protein universe," DeepMind chief executive Demis Hassabis said at a press briefing. "We're at the beginning of a new era of digital biology."

The 3D shape, or structure, of a protein is what determines its function in cells. Most drugs are designed using structural information, and the creation of accurate maps of proteins' amino-acid arrangement is often the first step to making discoveries about how proteins work.

DeepMind developed the AlphaFold network using an AI technique called deep learning, and the AlphaFold database was launched a year ago with more than 350,000 structure predictions covering nearly every protein made by humans, mice and 19 other widely studied organisms. Over the months that followed, the catalogue swelled to around 1 million structures.

# Modelado y simulación en Ciencias de Materiales

---

## Preguntas a priori

- La norma básica es que no existe un sólo modelo o método que nos permita explicar todas las posibles situaciones.
- El punto de partida fundamental es poder individualizar **las escalas de tiempo y distancias** importantes para nuestro problema particular:
  - ¿Con qué detalle necesito describir el material bajo estudio?
  - ¿Necesito tener en cuenta el aspecto atómico de un material para estudiar la propiedad o fenómeno que me interesa?.
  - ¿Es suficiente un cálculo estático o la dinámica es importante?

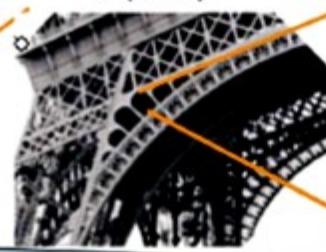
# Modelado y simulación en Ciencias de Materiales

$O(1000 \text{ m})$



Ingeniería estructural a Macroescala

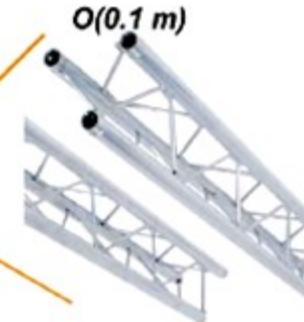
$O(10 \text{ m})$



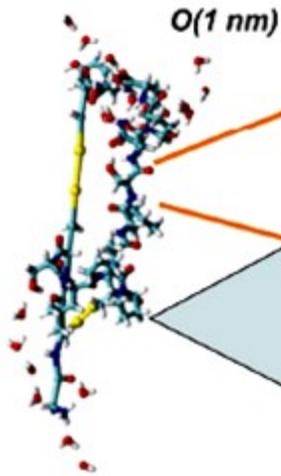
$O(1 \text{ m})$



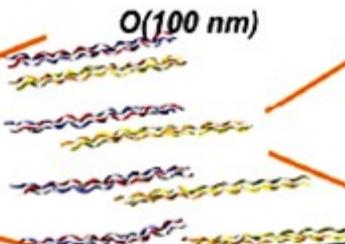
$O(0.1 \text{ m})$



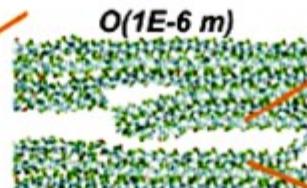
$O(1 \text{ nm})$



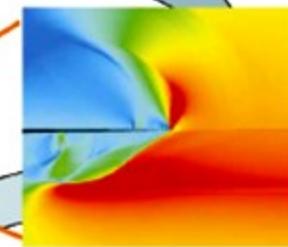
$O(100 \text{ nm})$



$O(1E-6 \text{ m})$

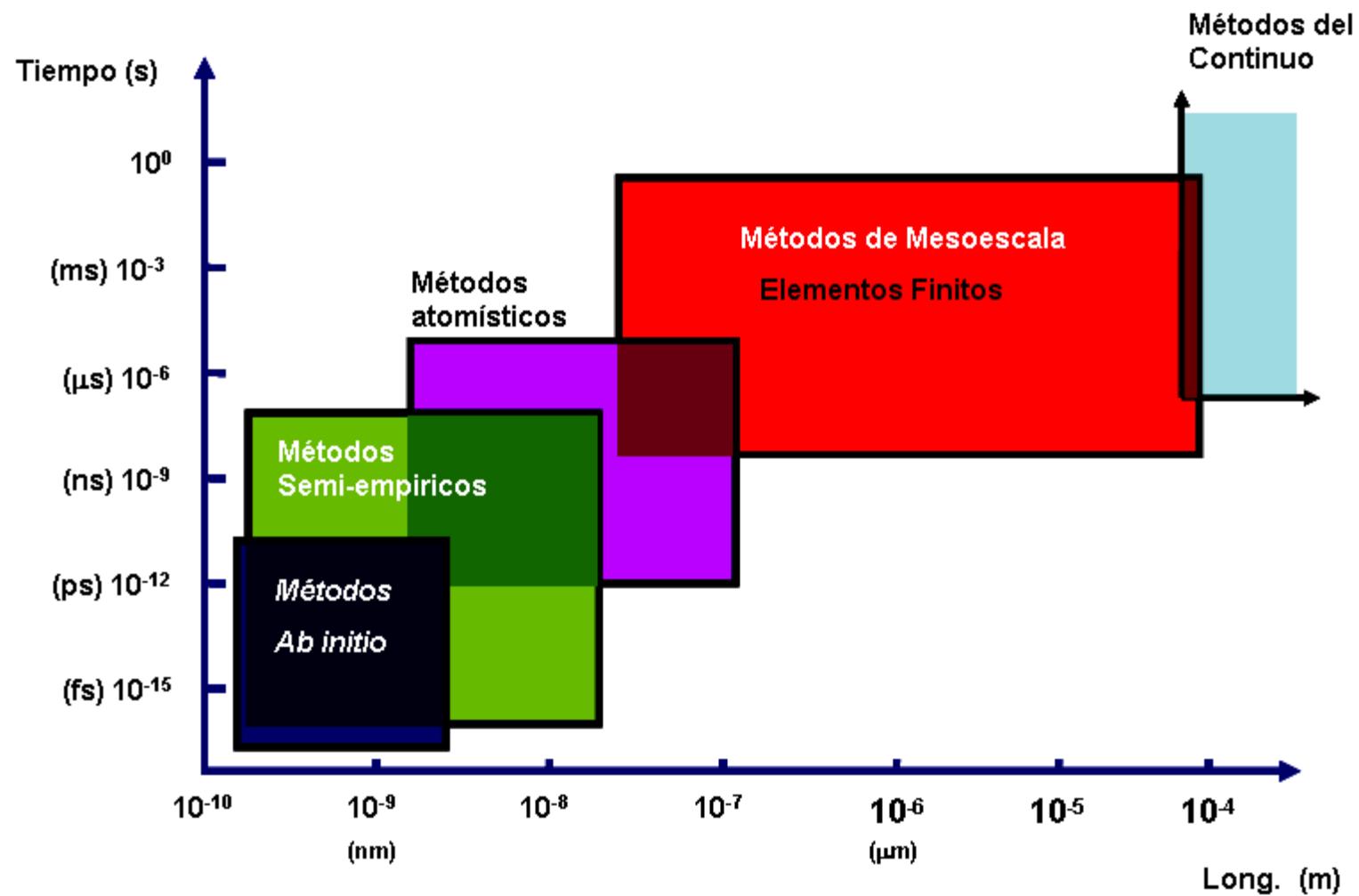


$O(0.01 \text{ m})$

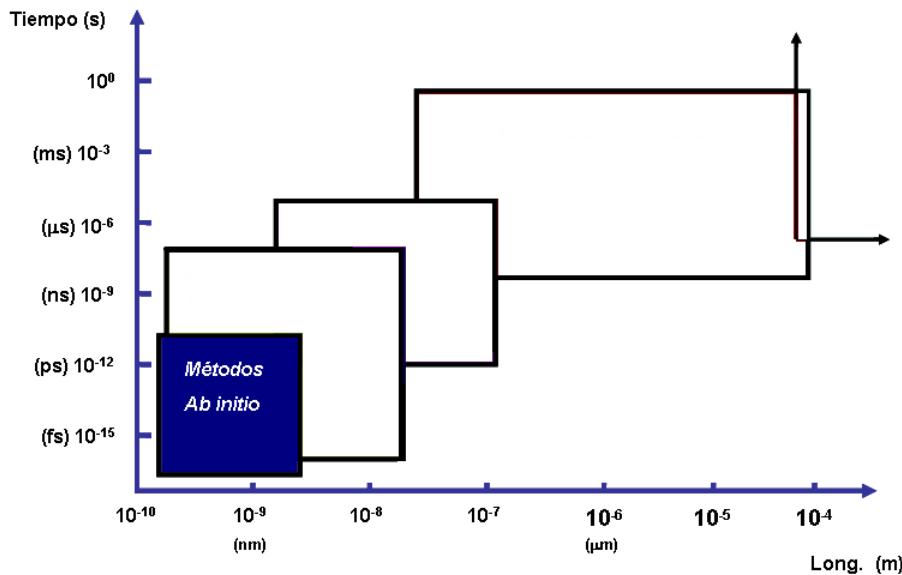


Ingeniería estructural a Ultraescala

# Rangos de aplicación de cada modelo



# Métodos ab initio (química cuántica)

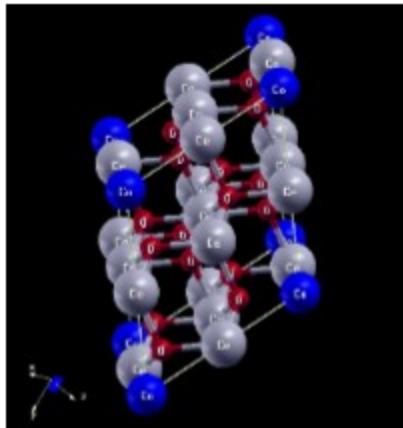


- Cálculos de **primeros principios**: resuelven la ecuación de Schrödinger numéricamente
- No utilizan parámetros ajustables, son generales y sirven para «todo» tipo de átomos y sistemas.
- Tienen en cuenta el enlace químico entre los átomos con todo detalle.
- Hartree-Fock, DFT

Para qué sirven?

- Estabilidad relativa entre fases cristalográficas
- Energías de cohesión o ligadura
- Naturaleza de los enlaces químicos intervenientes
- Propiedades electrónicas (transporte eléctrico)
- Propiedades magnéticas
- Aplicaciones en catálisis, reacciones químicas, etc.

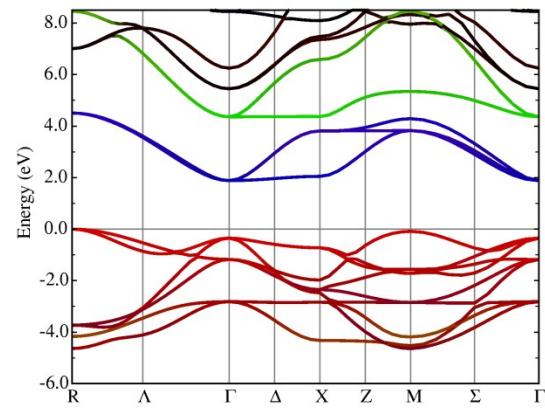
# Métodos ab initio (química cuántica)



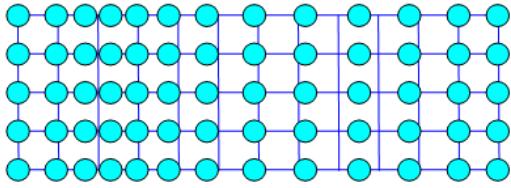
Estabilidad de  
Estructuras

Electrónica

Métodos ab initio



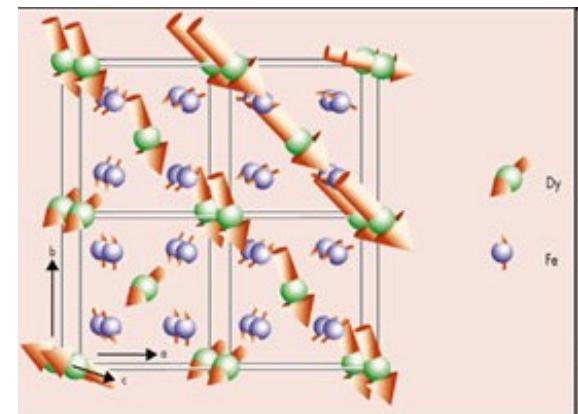
Vibraciones



Óptica



Magnetismo



# Métodos ab initio: pros/cons

---

## Pros:

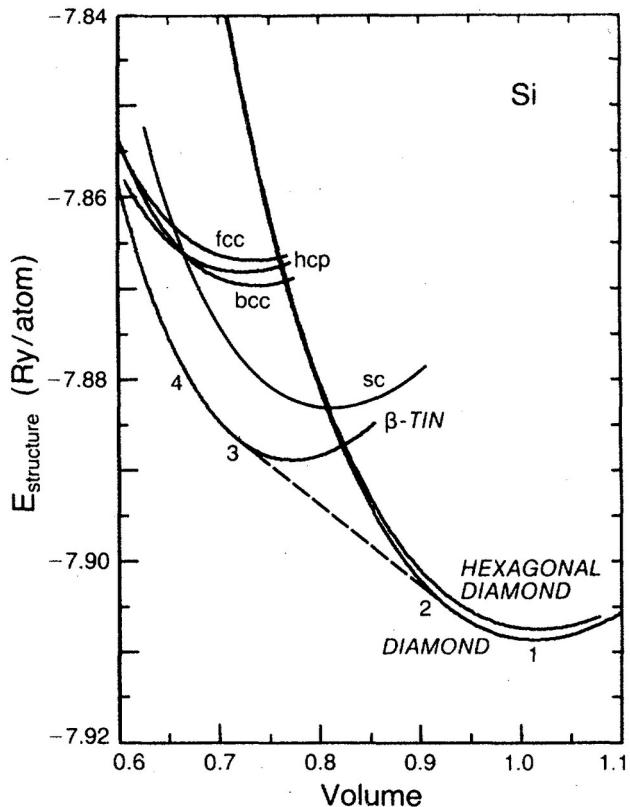
- Dan una información **microscópica** muy detallada y con fundamentos firmes.
- Pueden tratar procesos que involucran rotura/formación de enlaces electrónicos (reacciones químicas!!).
- Ofrecen formas de mejorar sistemáticamente la calidad del cálculo.
- Pueden (en principio) obtener propiedades exactas sin más datos que los átomos participantes.

## Cons:

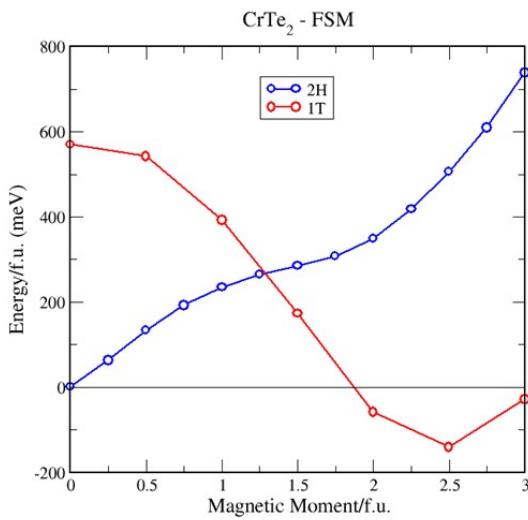
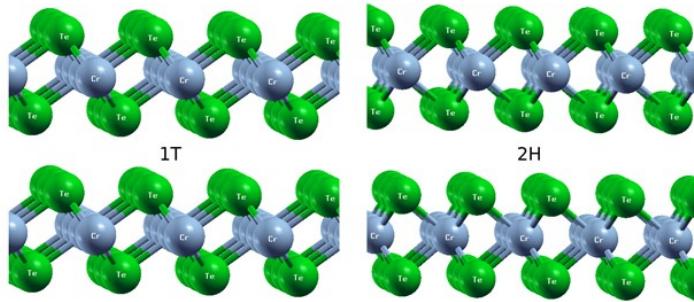
- Pueden manejar sistemas relativamente pequeños, a lo sumo del orden de los cientos de átomos.
- Pueden estudiar sólo procesos relativamente rápidos, del orden de los  $10^{-12}$  seg).
- Son numéricamente caros (en memoria y tiempos de ejecución).

# Métodos ab initio: ejemplos

## Estructura estable de Si (Yin, Cohen, 1982)



## Nuevos materiales ferromagnéticos bidimensionales



# Métodos ab initio: ejemplos

## Li-O<sub>2</sub> batteries – Verónica Vildosola

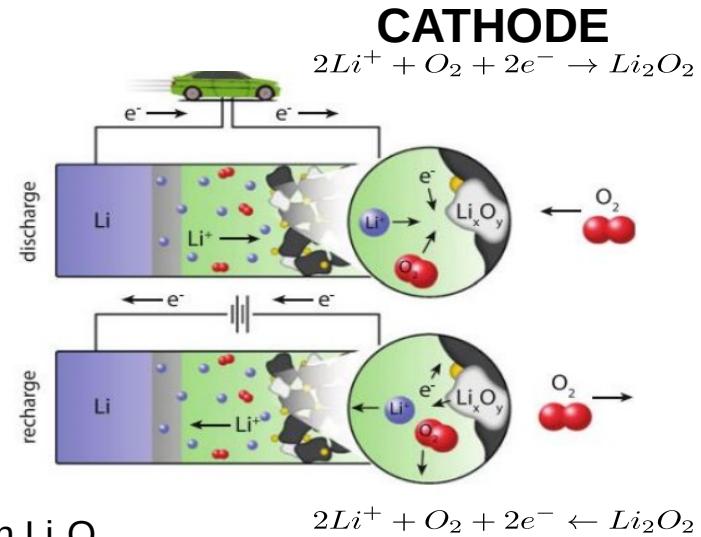
High Gravimetric energy density

Li-ion	Li-O <sub>2</sub>
~200 Wh/kg	~1000 Wh/kg

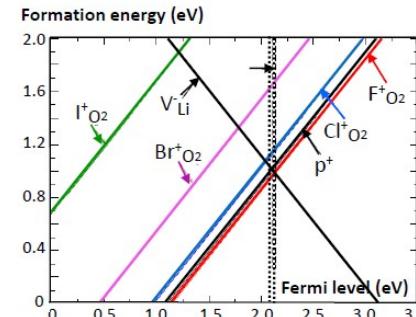
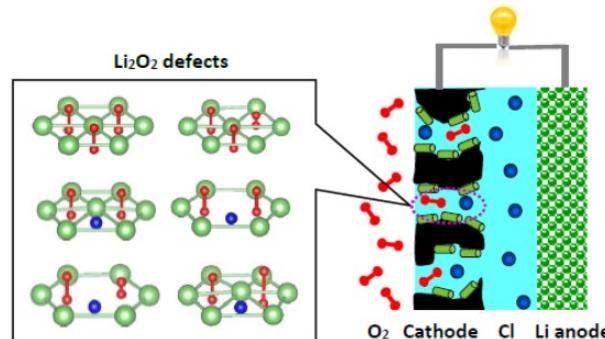
Main limitation:

$Li_2O_2$  is a large gap insulator

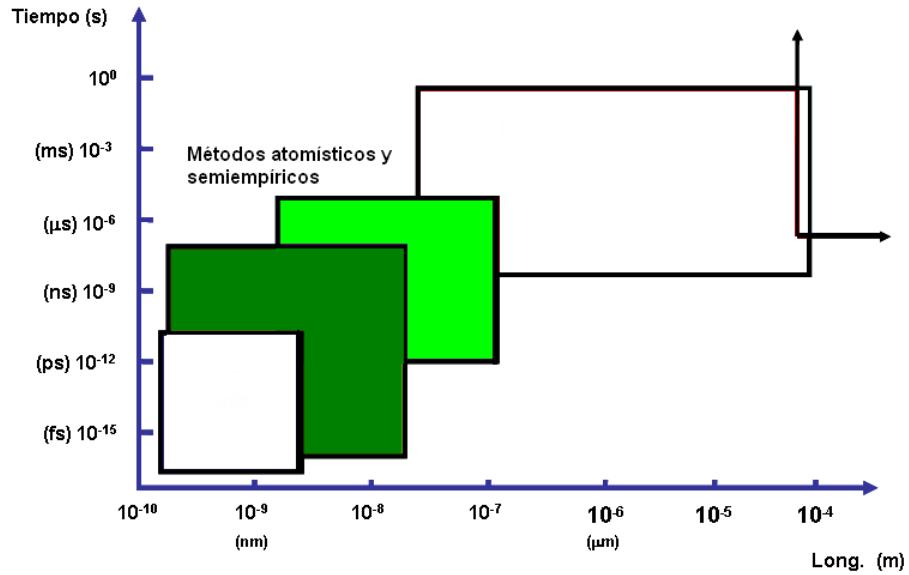
- Low capacity of the battery
- Poor efficiency, large recharge potential



DFT is a useful tool to find understand the charge transport in Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and find ways to improve the conductivity



# Métodos semi-empíricos y atomísticos



Resuelven el problema a **nivel atómico**, pero usando formas simplificadas para tratar la interacción entre electrones y entre átomos.

Un ejemplo típico es el método *tight-binding*, que vieron en *Física del Sólido*, donde eventualmente los parámetros pueden depender de la posición y del entorno:  $t_{ij}(r)$

Los métodos semiempíricos incluyen la interacción entre electrones en forma aproximada.

Los métodos atomísticos no tratan explícitamente los electrones, sólo usan campos de fuerzas empíricos o derivados de cálculos ab initio.

# Métodos semi-empíricos y atomísticos: pros/cons

---

## Pros:

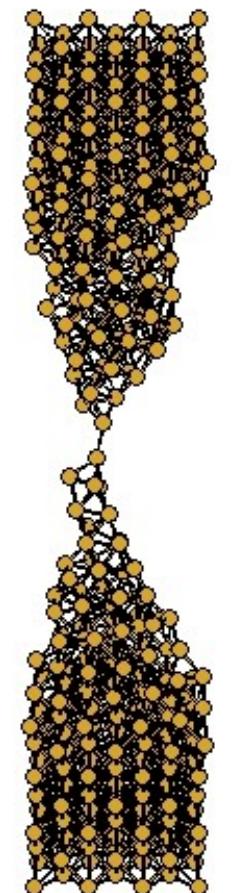
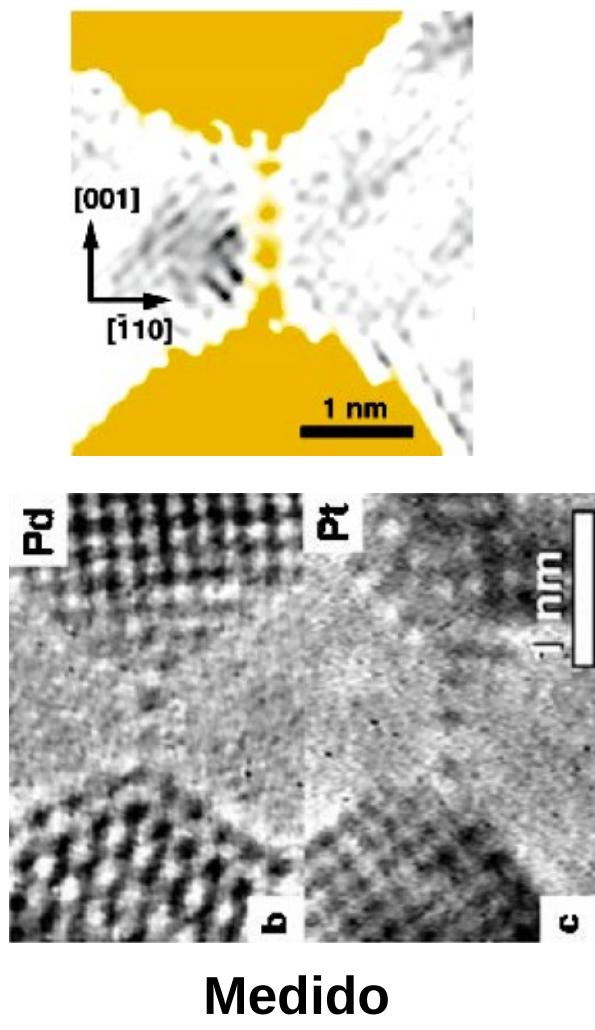
- Pueden trabajar con sistemas más grandes y más complejos que los métodos ab initio, usualmente miles y hasta millones de átomos (dependiendo de la precisión requerida).
- Se pueden usar en procesos que involucren escalas de tiempo más largas, desde nanosegundos hasta microsegundos
- Son muy útiles para estudiar propiedades estadísticas, termodinámicas y de transporte.

## Cons:

- Los resultados dependen críticamente de la calidad del modelo utilizado para representar el sistema.
- Necesitan información de experimentos o de cálculos ab initio y, en general, de muchos parámetros
- No pueden tratar algunas propiedades, como magnetismo, sin parámetros externos fijados ad hoc

## Ejemplo: nanocontactos

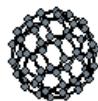
---



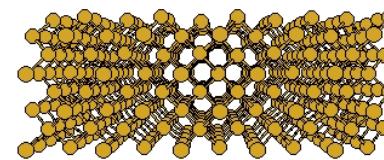
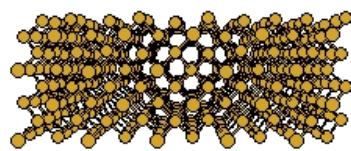
# Ejemplo: Depósito de fullerenos sobre diamante y Si

---

10 eV



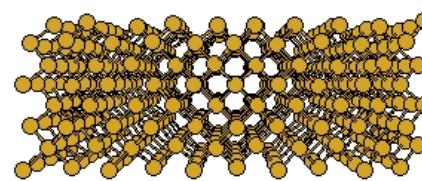
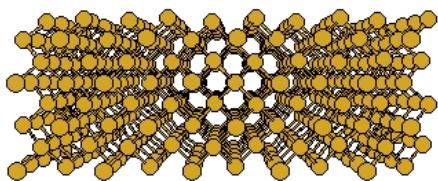
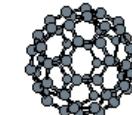
300 eV



500 eV



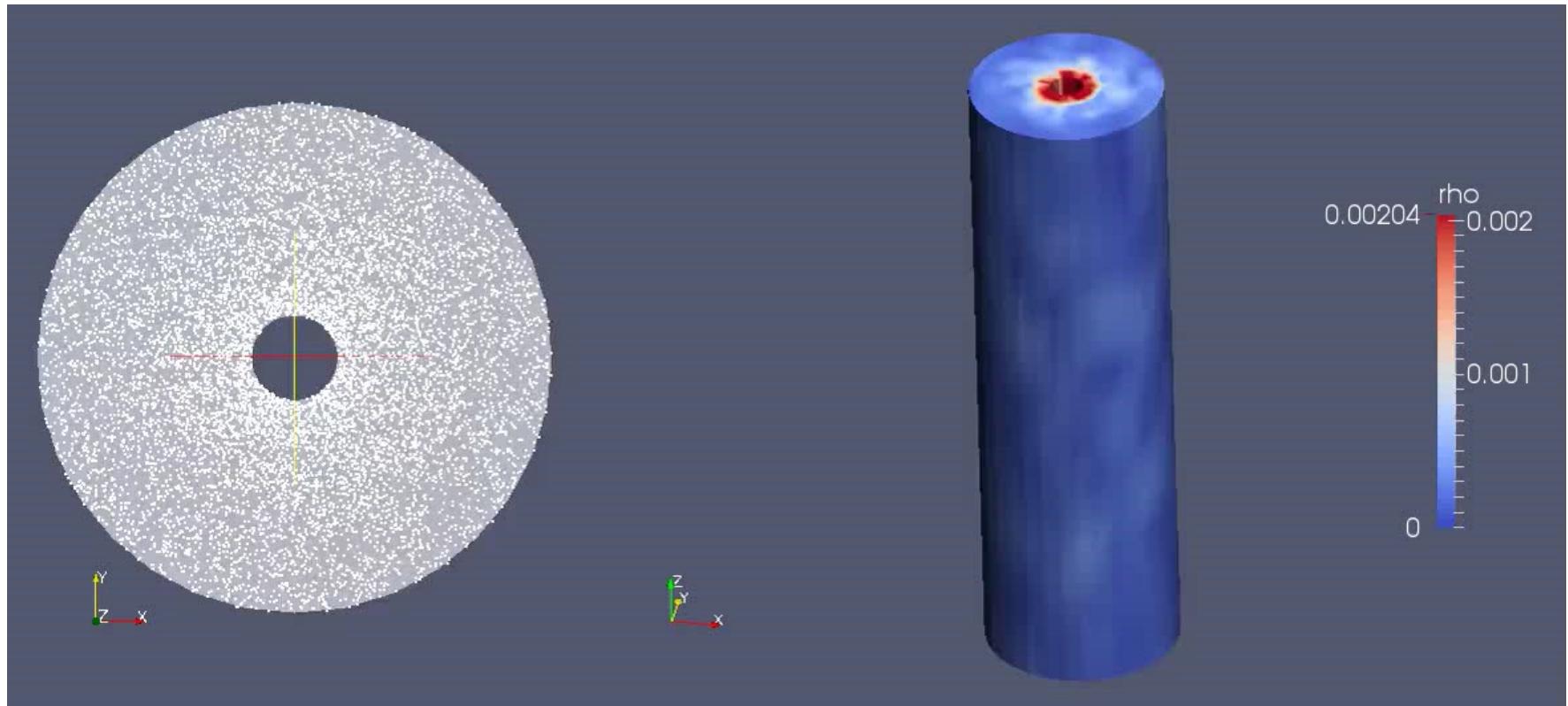
1000 eV



# Ejemplo: Enriquecimiento por centrifugado

---

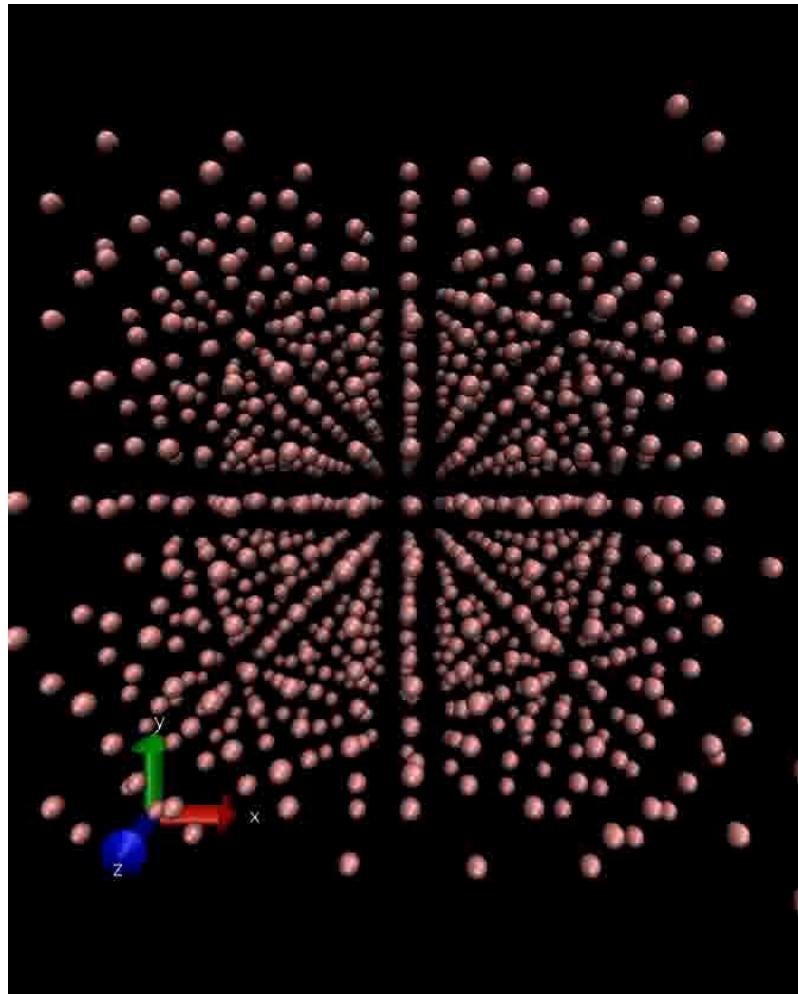
Paola Cordoba – Federico Berthalot



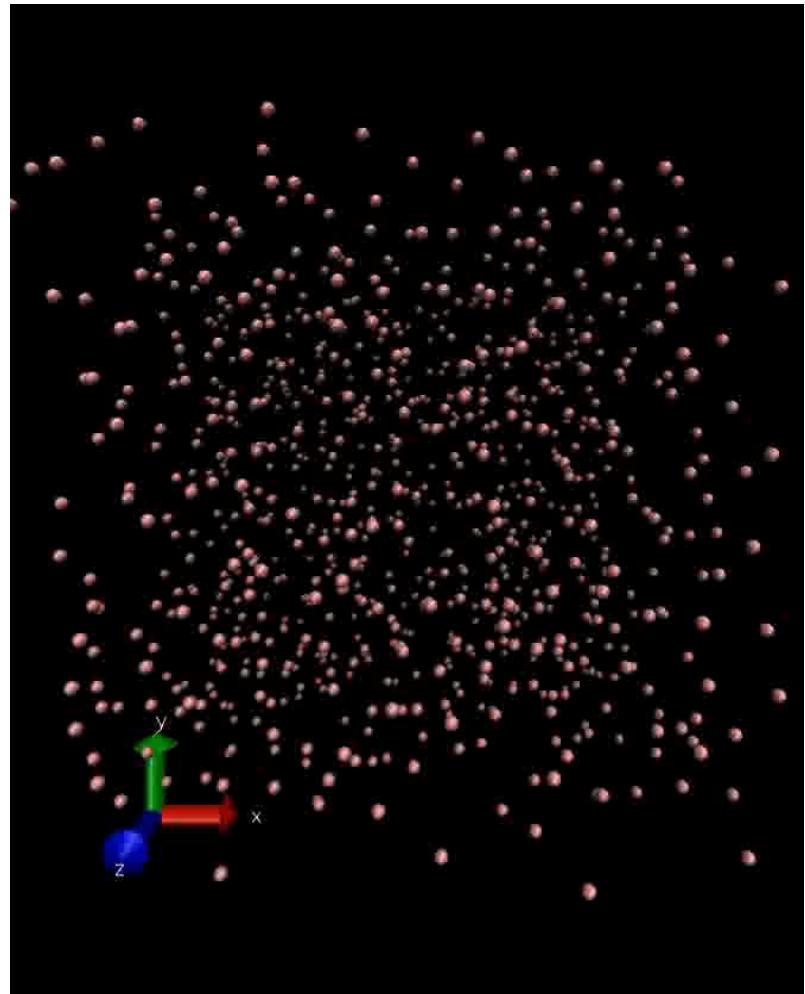
# Dinámica Molecular: Ar vs temperatura

Ignacio Larramendy - 2024

Sólido (baja temperatura)



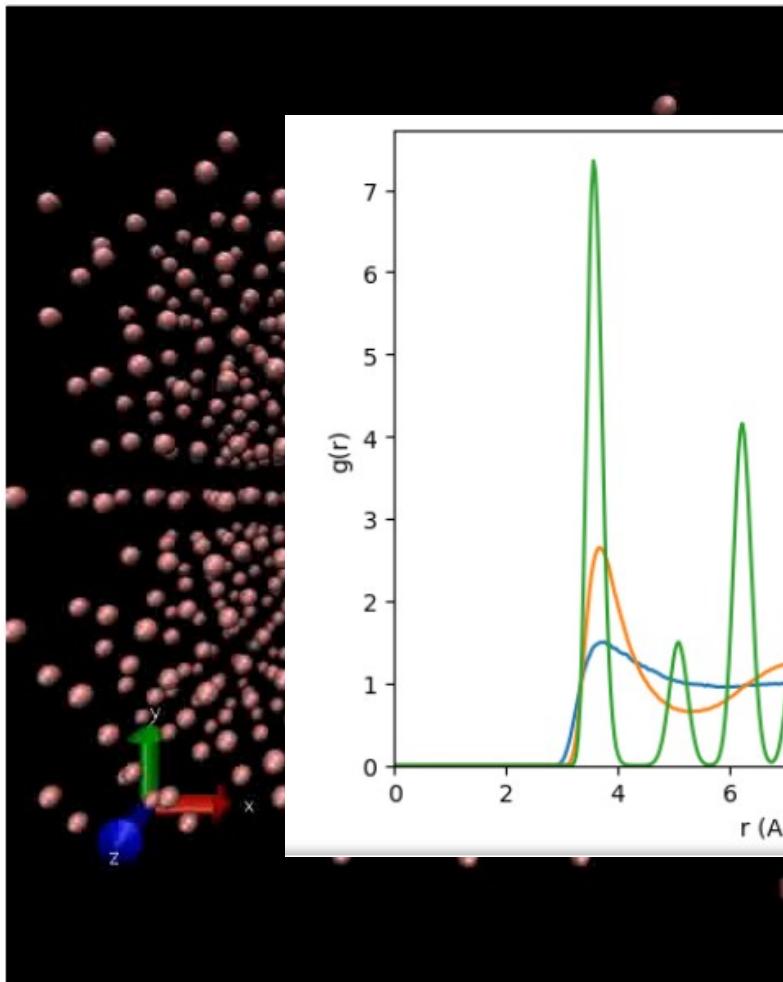
Gas (alta temperatura)



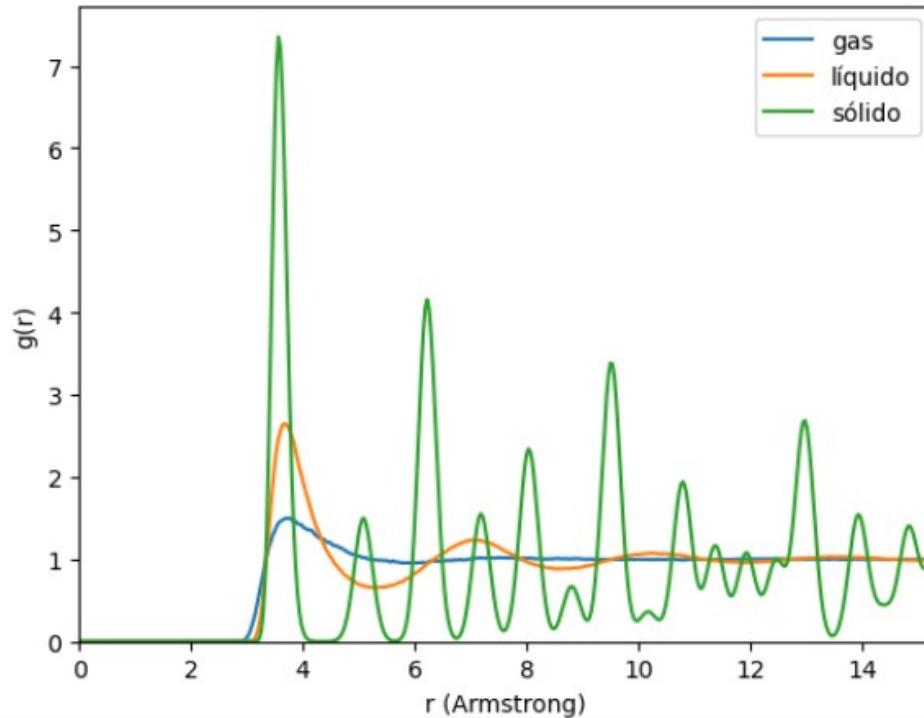
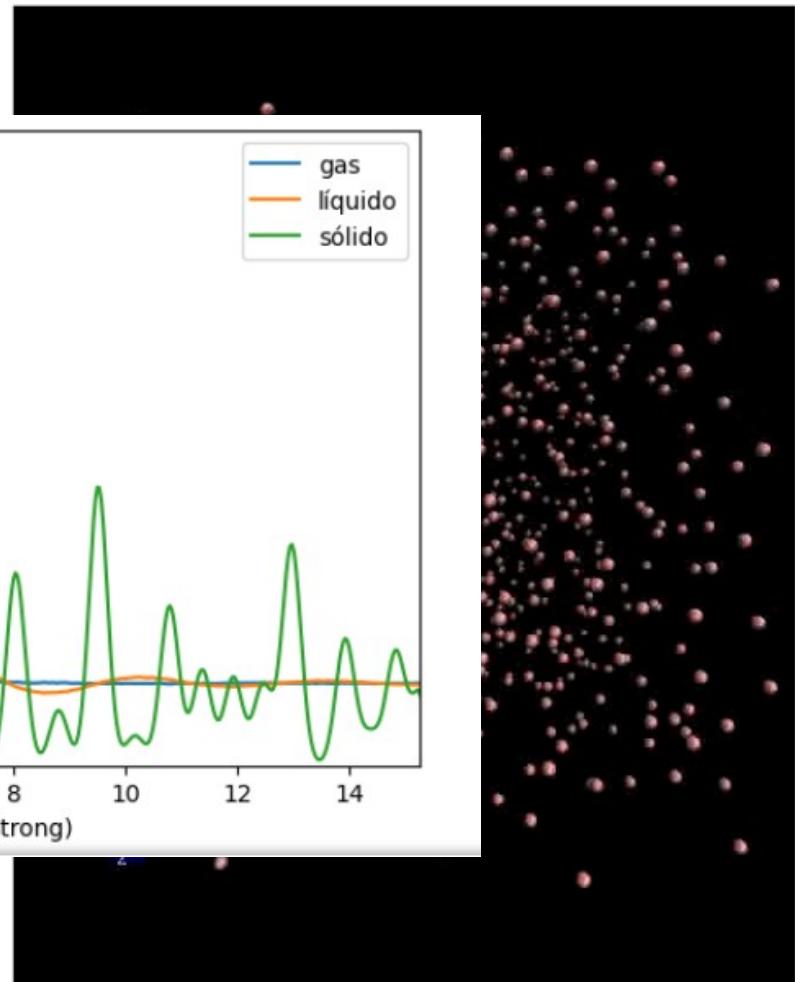
# Dinámica Molecular: Ar vs temperatura

Ignacio Larramendy - 2024

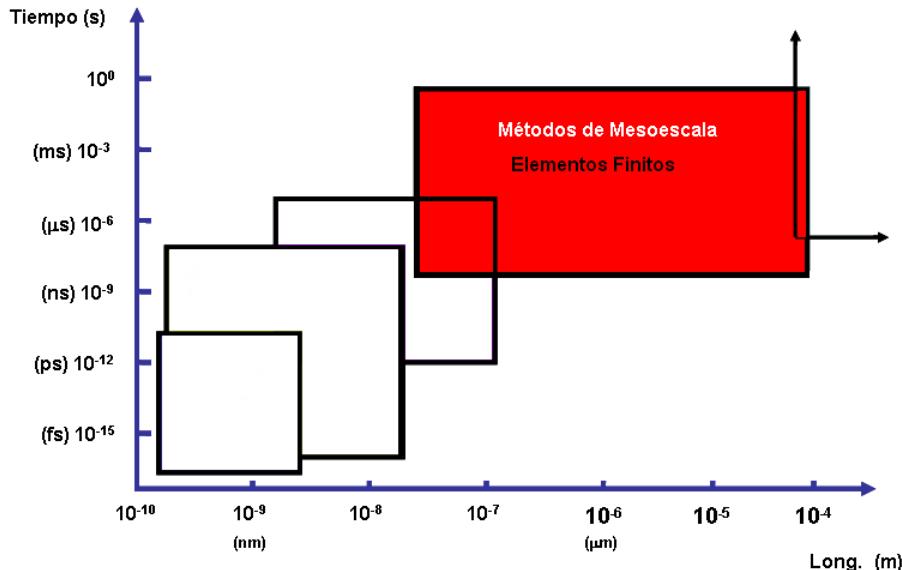
Sólido (baja temperatura)



Gas (alta temperatura)



# Métodos de mesoescala



Asumen que la materia es continua y tratan las propiedades del sistema como **campos**. Numéricamente resuelven sistemas de ecuaciones de balance (masa, calor, etc), con ecuaciones fenomenológicas (elasticidad, difusión, etc). Métodos típicos son el de **diferencias finitas** y el de **elementos finitos**.

## Pros:

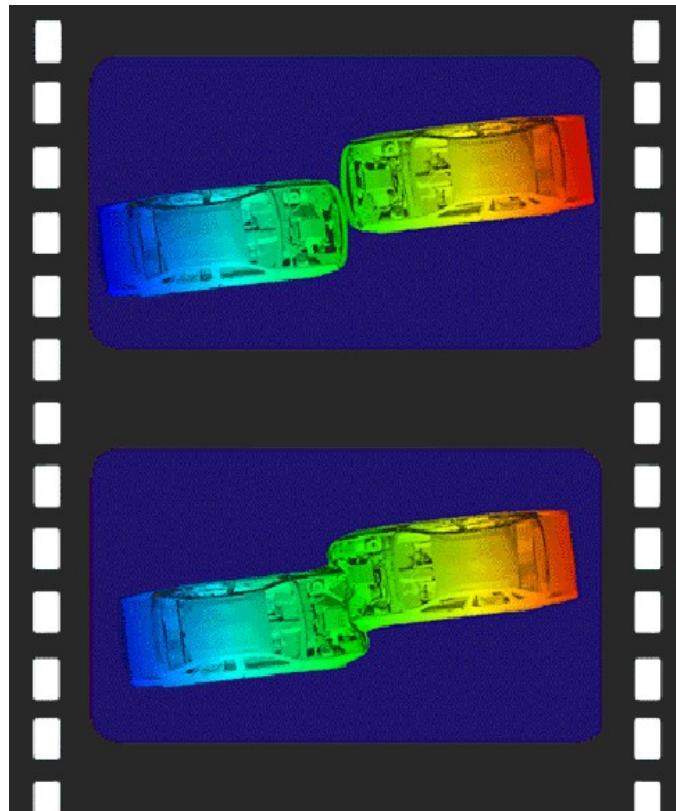
- Pueden, en principio, tratar sistemas de cualquier tamaño y procesos dinámicos a escalas reales

## Cons:

- Requieren datos experimentales (tensor elástico, coeficientes de difusión, ecuaciones de estado, etc) o de métodos mas detallados.
- No pueden explicar resultados que dependan de la naturaleza atómica o electrónica de la materia, como sus ligaduras químicas

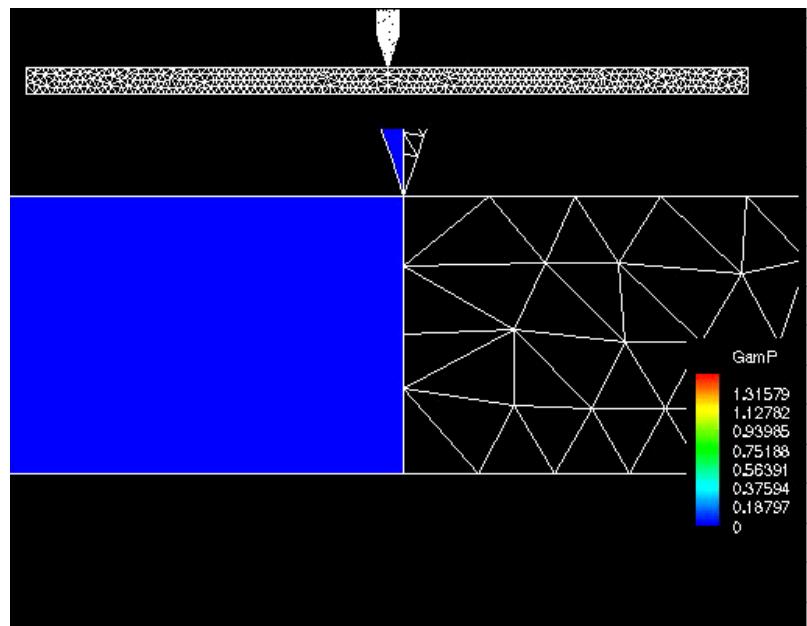
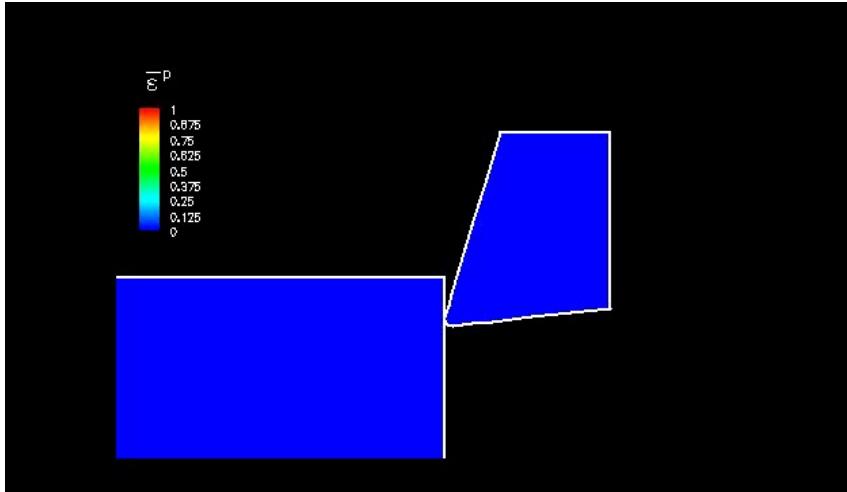
# Método de elementos finitos: ejemplos

---



# Método de elementos finitos: ejemplos

---



# Cálculos a multiescala

---

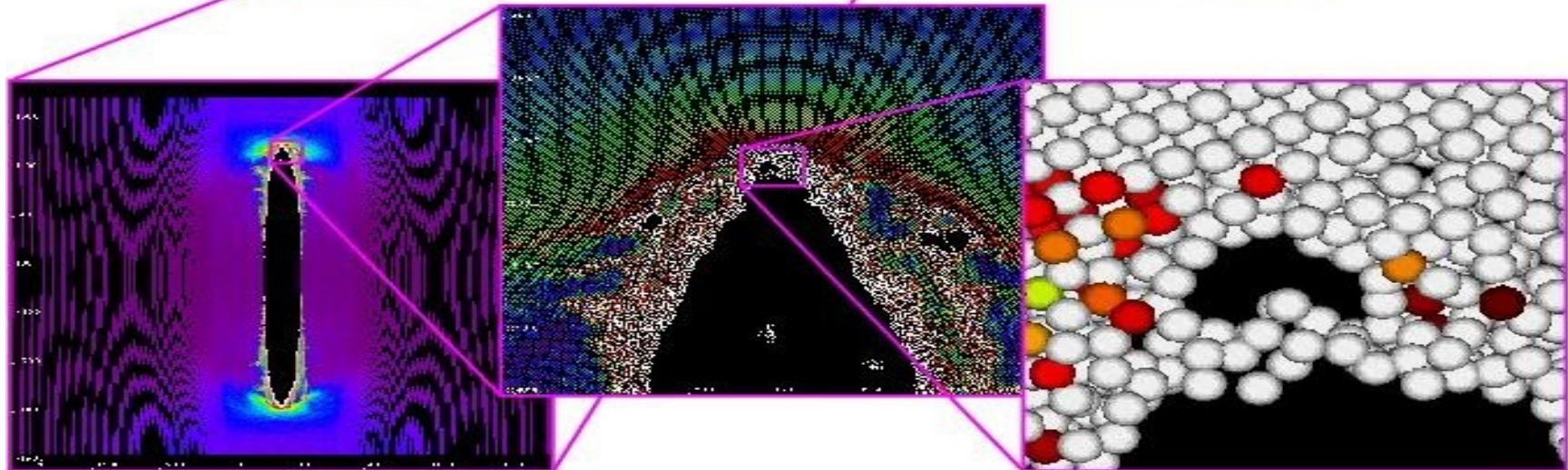
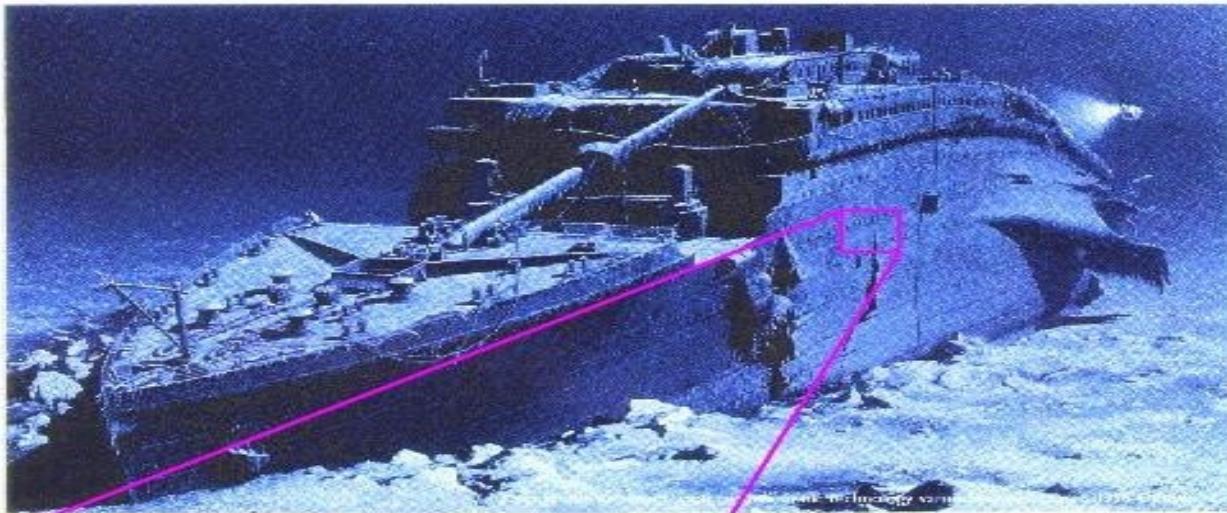
**Se intenta realizar una conexión entre diferentes escalas y métodos**

**Ejemplos:**

- Cálculos de constantes fenomenológicas (tensores elásticos, viscosidades, difusividades, etc) utilizando métodos atomísticos para ser usados en modelos continuos.
- *Fitting* de campos de fuerzas usando métodos *ab initio*, para realizar simulaciones atomísticas.
- Derivación de superficies de potencial de reacciones químicas para realizar simulaciones de dinámica molecular.
- Métodos que combinan explícitamente varias técnicas y escalas.

# Cálculos a multi-escala: ejemplo

---



# Simulación computacional: Herramientas previas

---

## Cálculo numérico

- Aproximaciones y errores
- Raíces de ecuaciones
- Ecuaciones algebraicas lineales
- Optimización
- Ajuste de funciones e interpolación
- Diferenciación e integración numérica
- Ecuaciones diferenciales ordinarias
- Ecuaciones diferenciales derivadas parciales

# Bibliografía

---

## Métodos numéricos:

- **Métodos Numéricos para Ingenieros.** Steven Chapra, Raymond Canale
- **Numerical Methods in Engineering with MATLAB,** Jaan Kiusalaas
- **Métodos Numéricos.** Richard Burden, Douglas Faires
- **Advanced Engineering Mathematics,** Kreyszig
- **Numerical recipes:** <http://www.nr.com/>

## Método de Elementos Finitos:

- **A First course in the Finite Element Method.** Logan
- **The Finite Element Method for Engineers.** Huebner, Dewhirst, Smith, Byrom
- **Programming the Finite Element Method.** Smith, Griffiths.
- **Fundamentals of Finite Element Analysis.** Hutton
- **Zienkiewicz et al.**

# Bibliografía

---

## Métodos de simulación en Ingeniería:

- Computational Materials Science. Diekr Raabe
- Introduction to Materials Modelling. Barber.
- Numerical Modeling in Materials Science and Engineering. Rappaz, Bellet, Deville.
- Computational Materials Science. Ohno, Esfarjani, Kawazoe.

## Simulación de Materiales:

- Understanding Molecular Simulation. Daan Frenkel, Berend Smit.
- The Art of Molecular Dynamics Simulation. D.C. Rapaport.
- Computational Physics. J.M. Thijssen.
- Electronic Structure. Richard M. Martin.

# Resumen de la materia

---

## Temas a tratar

- Repaso **rápido** de algunos métodos numéricos ya vistos (Pablo)
- Solución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales: métodos de diferencias finitas y de elementos finitos
- Introducción a los métodos atomísticos, métodos de Monte Carlo y Dinámica Molecular, etc, y algunos ejemplos de IA

Lenguaje: Python + Jupyter

Correo de consultas: **model.sabato@gmail.com**

Aula Virtual: **<https://modelsabato.github.io/2025/>**

Aula temporaria:

**<https://github.com/rweht-unsam/Model-Sabato.github.io>**

# Modelado y Simulación: Calendario

**Martes y Viernes: 16:15 a 18:15 hs (19 hs?)  
(29 días de Clases + Exposición Final)**

## INGENIERÍA EN MATERIALES – CALENDARIO MARZO-JULIO 2025

■ Inicio de clases: Miércoles 5 de Marzo  
■ Exámenes finales (1 al 15 de Julio).  
■ Vacaciones (17 de Julio al 01 de Agosto)

■ Fin del cuatrimestre: 30 de Junio (incluidos exámenes parciales)

2025																																		
D	L	M	M	J	V	S	D	L	M	M	J	V	S	D	L	M	M	J	V	S	D	L	M	M	J	V	S							
MARZO							ABRIL							MAYO							JUNIO							JULIO						
		3	4	5	6	7	8			1	2	3	4	5				1	2	3	1	2	3	4	5	6	7		1	2	3	4	5	
9	10	11	12	13	14	15	6	7	8	9	10	11	12	4	5	6	7	8	9	10	8	9	10	11	12	13	14	6	7	8	9	10	11	12
16	17	18	19	20	21	22	13	14	15	16	17	18	19	11	12	13	14	15	16	17	15	16	17	18	19	20	21	13	14	15	16	17	18	19
23	24	25	26	27	28	29	20	21	22	23	24	25	26	18	19	20	21	22	23	24	22	23	24	25	26	27	28	20	21	22	23	24	25	26
30	31						27	28	29	30				25	26	27	28	29	30	31	29	30						27	28	29	30	31	1	

### Feriados:

- 3 y 4 de Marzo (Lunes y Martes). Carnaval y Feriado puente turístico.
- 24 de Marzo (Lunes). Día Nacional de la Memoria por la Verdad y la Justicia.
- 2 de Abril (Miércoles). Día del Veterano y de los Caídos en la Guerra de Malvinas.
- 17 y 18 de Abril (Jueves y Viernes). Jueves y Viernes Santo.
- 1 y 2 de Mayo (Jueves y Viernes). Día del trabajador y Feriado puente turístico.
- 25 de Mayo (Domingo). Día de la Revolución de Mayo.
- 16 de Junio (Lunes). Paso a la Inmortalidad del Gral. Don Martín M. de Güemes.
- 20 de Junio (Viernes). Paso a la Inmortalidad del Gral. Manuel Belgrano.
- 27 de junio (Viernes). Día del Empleado de la APN
- 9 de Julio (Miércoles). Día de la Independencia.