



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

# **Introducción a la modelización en Física**

**Grado en Física**

**4º curso**

El autor/La autora se acoge al artículo 32 de la Ley de Propiedad Intelectual vigente respecto al uso parcial de obras ajenas, como imágenes, gráficos u otro material contenido en las diferentes diapositivas, dado el carácter y la finalidad exclusivamente docente y eminentemente ilustrativa de las explicaciones en clase de esta presentación.  
Facultad de Ciencias, Universidad de Alicante

# Introducción a la modelización en Física

## Profesorado

**Teoría:** José A. Pons

Jorge Calera

**Prácticas:** María José Caturla

Petros Stefanou

Clara Dehman

Jorge Calera



# Introducción a la modelización en Física

## Temario

0. Introducción → Herramientas gráficas y vectorización con python

### BLOQUE I

1. Clasificación de las ecuaciones en derivadas parciales. Significado físico.
2. Ecuaciones elípticas. Ejemplos: problema de Poisson.
3. Ecuaciones parabólicas. Ejemplos: ecuaciones de calor y de difusión.
4. Ecuaciones hiperbólicas. Ejemplos: la ecuación de advección y la ecuación de onda.
5. Algunos ejemplos no lineales: ecuación de Burgers.

### BLOQUE II

6. Construcción de redes cristalográficas.
7. Resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias.
8. Dinámica molecular.
9. Métodos Monte Carlo. Generación de número aleatorios. Integración.
10. Métodos Monte Carlo. El algoritmo de Metropolis aplicado a mecánica estadística.

*Clases prácticas: el temario podrá modificarse a lo largo del curso*



# Introducción a la modelización en Física

## Bibliografía

### **Computational physics**

Newman, Mark, 2013;

**(Bloque I) A first course in the numerical analysis of differential equations** Iserles, Arie, Cambridge University Press, 2014

**(Bloque II) Equilibrium statistical physics : with computer simulations in Python** Sander, Leonard Michael

(Algoritmos) Numerical recipes: the art of scientific computing, W.H. Press, S.A. Teukol-sky, W.T. Vetterling, and B.R. Flannery (Cambridge University Press, Cambridge UK, 1992)

*Y muchísimos más tanto en papel como electrónicos ...*



# **Introducción a la modelización en Física**

## **Recursos Web**

### **Computational physics**

Newman, Mark, 2013;

**<http://www-personal.umich.edu/~mejn/cp/>**

### **Computational physics : simulation of classical and quantum systems**

SCHERER, Philipp O.J., Berlin : Springer, 2010 (Online)



# **Introducción a la modelización en Física**

## **Evaluación**

**Entrega de trabajos del Bloque I (individual) 25%**

**Entrega de trabajos del Bloque II (individual) 25%**

**Exposición de un trabajo en grupo (3 personas)  
30%**

- 18 de diciembre - bloque I (bloque II opcional)
- 20 de enero - bloque II

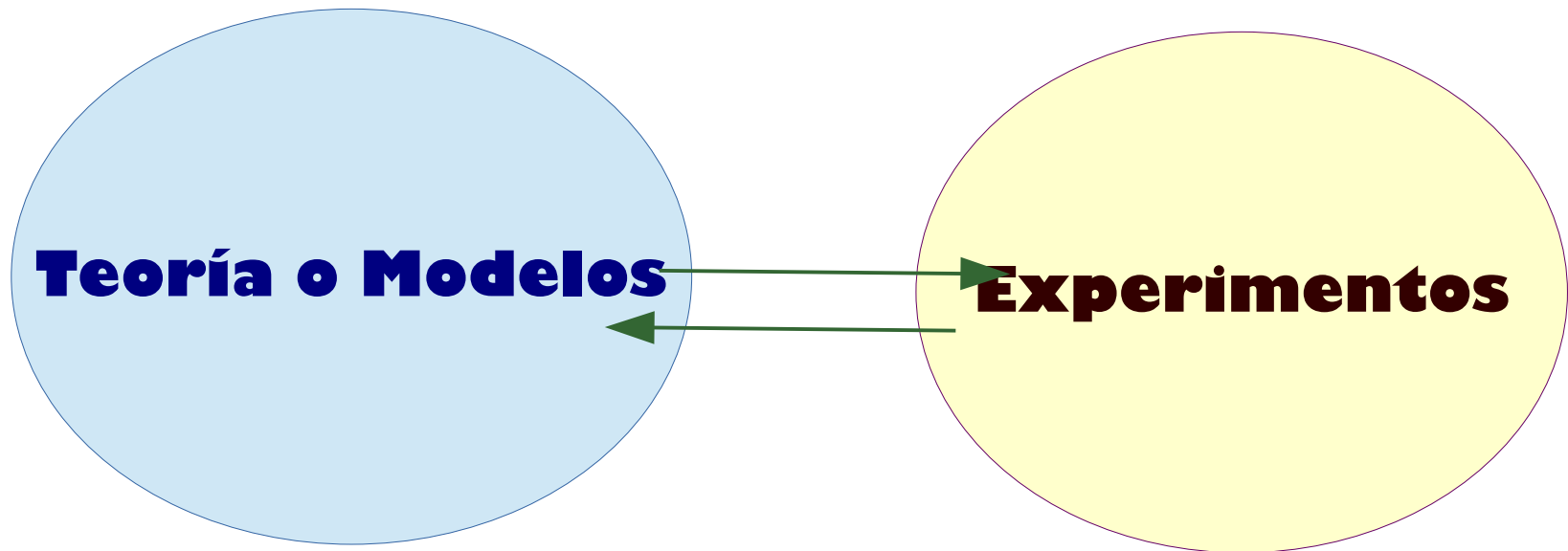
**Examen Final 20% (mínimo de 4 puntos)**

- 20 de enero de 2025 (C2)
- 8 de julio de 2025 (C4)



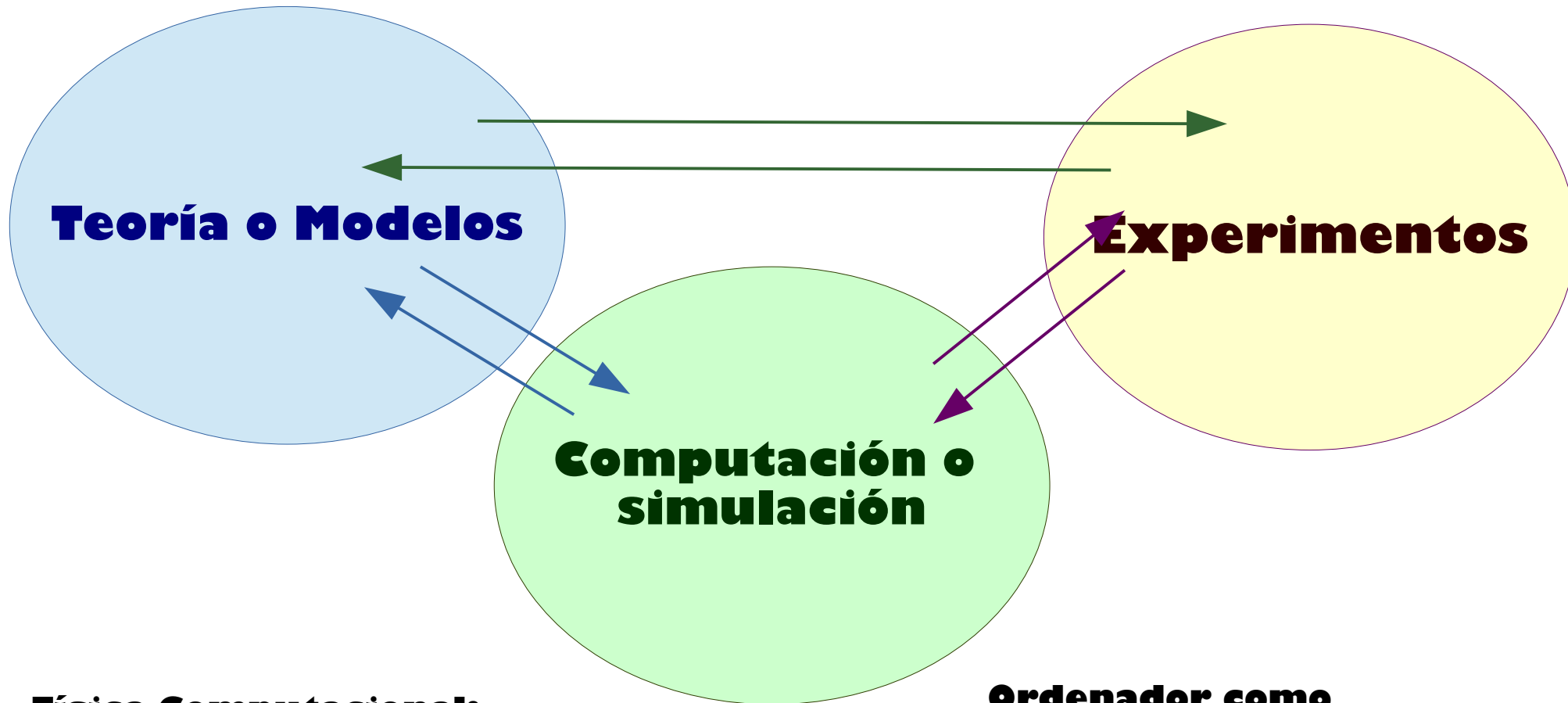
# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



**Física Computacional:**  
cálculos de problemas físicos  
utilizando ordenadores

**Ordenador como herramienta:** si no existe  
solución analítica o la resolución  
teórica es muy costosa.

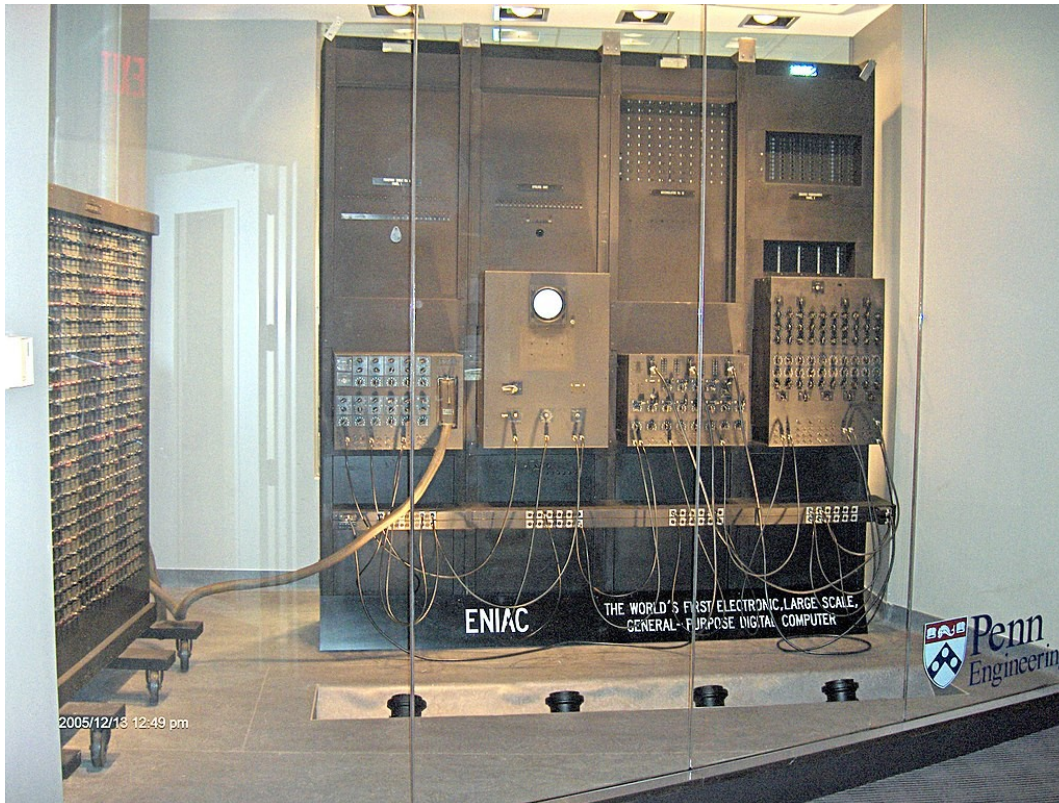




# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

### **ENIAC:** Electronic Numerical Integrator and Computer



1946

University of Pennsylvania, EEUU

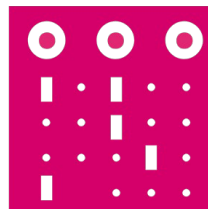
~ 17.000 tubos de vacío

Cinco mil sumas por segundo



<https://en.wikipedia.org/wiki/ENIAC>

Más en:  
<http://museo.inf.upv.es/va/>



Museu  
d'Informàtica



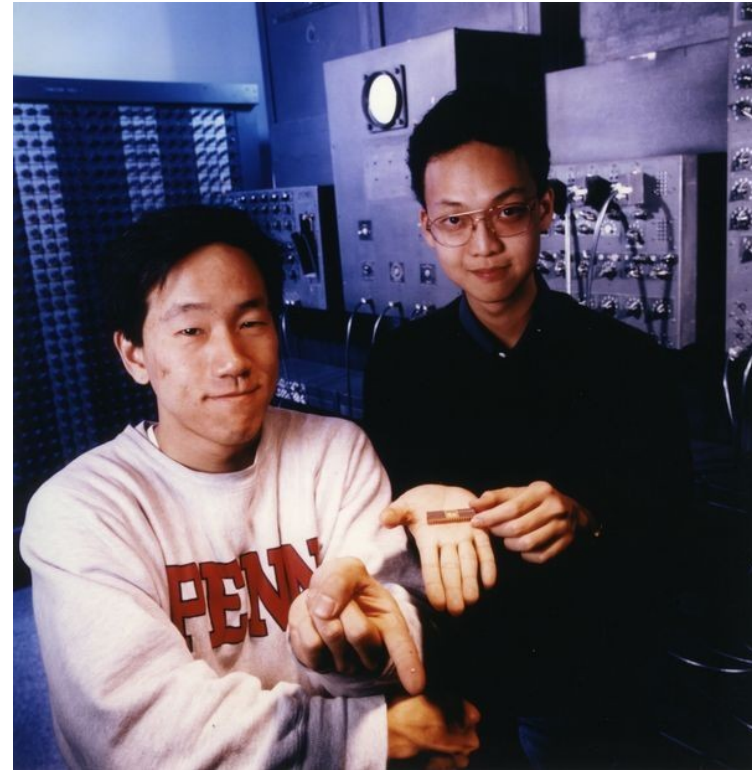
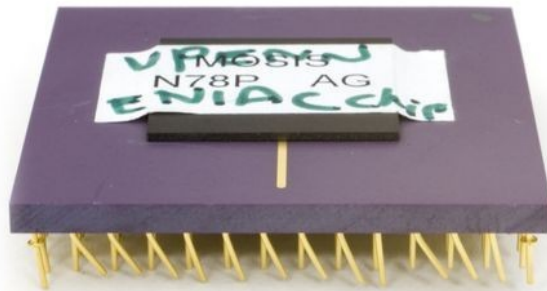
# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

**ENIAC:** Electronic Numerical Integrator and Computer

<https://www.computerhistory.org>

ENIAC on a chip



Courtesy of Almanac, the University of Pennsylvania

Copyright Owner © Mark Richards Copyright Owner © Mark Garvin / University of Pennsylvania



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

### El transistor y el circuito integrado

#### The Nobel Prize in Physics 1956

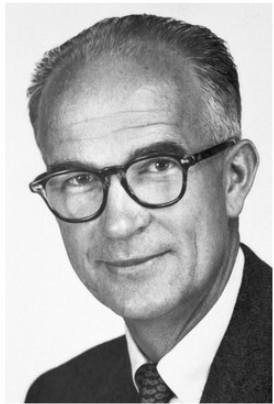


Photo from the Nobel Foundation archive.

**William Bradford Shockley**

Prize share: 1/3



**John Bardeen**

Prize share: 1/3



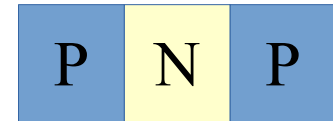
Photo from the Nobel Foundation archive.

**Walter Houser Brattain**

Prize share: 1/3



The Nobel Prize in Physics 1956 was awarded jointly to William Bradford Shockley, John Bardeen and Walter Houser Brattain "for their researches on semiconductors and their discovery of the transistor effect."

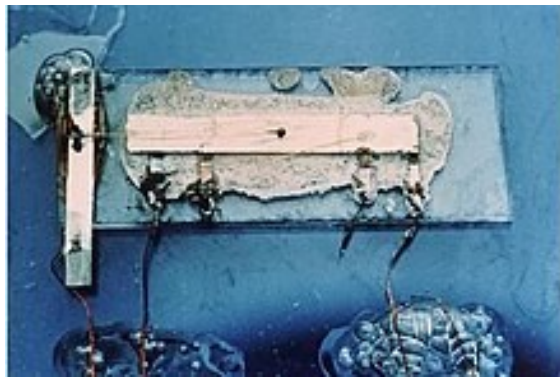


# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

### El transistor y el circuito integrado

The Nobel Prize in Physics 2000



J. Kilby – primer  
circuito integrado  
1958

Texas Instruments



Photo from the Nobel Foundation archive.

Zhores I. Alferov

Prize share: 1/4

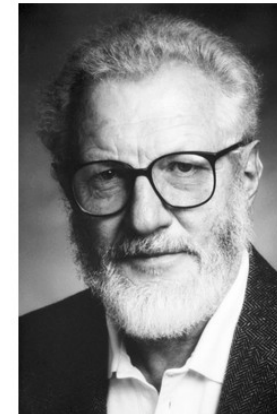


Photo from the Nobel Foundation archive.

Herbert Kroemer

Prize share: 1/4

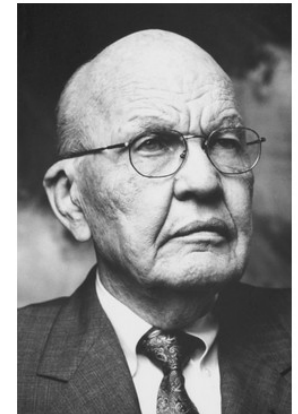


Photo from the Nobel Foundation archive.

Jack S. Kilby

Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Physics 2000 was awarded "for basic work on information and communication technology" with one half jointly to Zhores I. Alferov and Herbert Kroemer "for developing semiconductor heterostructures used in high-speed- and opto-electronics" and the other half to Jack S. Kilby "for his part in the invention of the integrated circuit."

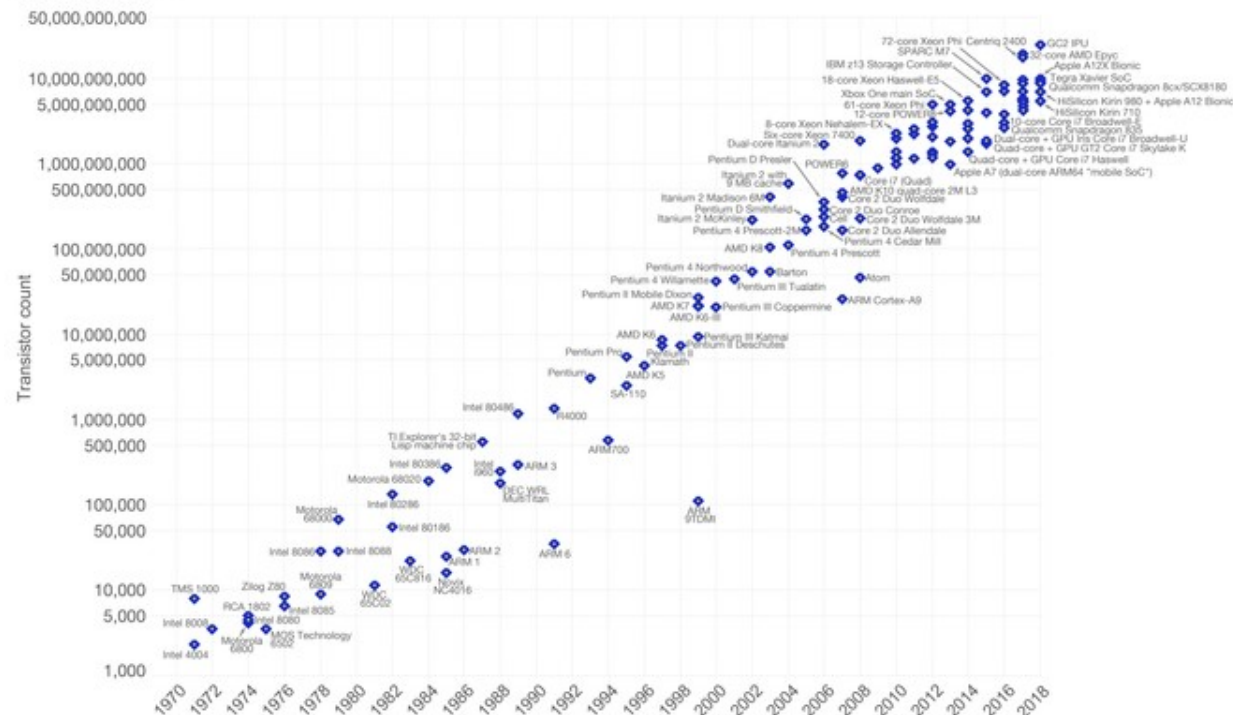
# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

La ley de Moore: número de transistores en un circuito integrado  $\sim$  el doble cada dos años

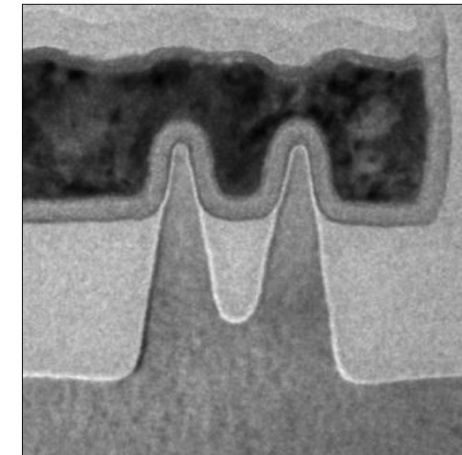
### Moore's Law – The number of transistors on integrated circuit chips (1971-2018)

Moore's law describes the empirical regularity that the number of transistors on integrated circuits doubles approximately every two years. This advancement is important as other aspects of technological progress – such as processing speed or the price of electronic products – are linked to Moore's law.



The data visualization is available at [OurWorldinData.org](https://ourworldindata.org). There you find more visualizations and research on this topic

Licensed under CC-BY-SA by the author Max Roser.



## 22 nm 1<sup>st</sup> Generation Tri-gate Transistor

R. Borkar, Intel (intel.com)



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

¿Qué es un superordenador/supercomputadora?

Conjunto de ordenadores unidos entre sí para aumentar su capacidad

The UA - Matcon cluster

Parallel computing



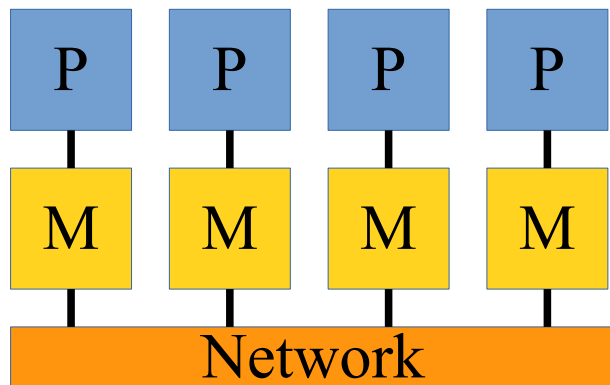
# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

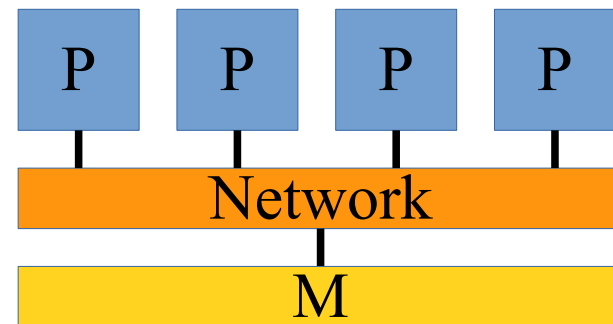
¿Qué es un superordenador/supercomputadora?

Conjunto de ordenadores unidos entre sí para aumentar su capacidad

Memoria distribuida



Memoria compartida



Message Passing

# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

```
caturla@mat01: /mnt/mat01_dsk1/MA_free_surface_OK/50keV/50keVF/theta_158/120
Archivo  Editar  Ver  Buscar  Terminal  Ayuda

[Progress bars for various tasks]

Tasks: 59, 136 thr: 23 running
Load average: 21.28 21.47 21.31
Uptime: 13 days, 16:08:32

<Ch.Hill@xase.org> Date: Fri, Apr 5, 2019 at 10:10 AM Subject: cascadesdli.org To: Maria
...
vale. Entonces, aquí va un programa con el que puedes cambiar los datos al formato que quieren para la base de datos.
Solo tienes que copiarlo (o formatearlo readlastcopy) y
Te pedirá el nombre del fichero (buscador con el nombre
Si te da problemas me dices. Con esto, puedes empezar a preparar ficheros de datos para subirlos. Intenta poner uno primero y si te da problemas me
Gracias.

PID USER      PR  NI  VIRT  RES  SHR  %CPU  %MEM    TIME+ Command
36294 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 5836  0.220  4.5  636h /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38882 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  152:22 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38883 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  149:31 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38817 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  152:22 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38881 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  152:22 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38888 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38813 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38819 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38884 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  149:31 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38818 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38880 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38812 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38814 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  99.4  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38815 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:17 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38883 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38818 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:17 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38887 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:17 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38811 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:18 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38826 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  99.4  4.5  146:17 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38886 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  149:31 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38880 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  152:22 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
38816 jamedcd  20   0 13.8G 3799M 836  100  4.5  146:17 /home2/jamedcd/g99/1502.exe 1476395988 /scratch/Gau-36504.chk 0 /scratch/Gau-36504.int 0 /scratch/Gau-36504.rwf 0 /scratch/Gau-36504.d2e 0 /scratch/Gau-36504.scr 0 /scratch
43299 caturla  20   0 121M  488  460  2.6  0.0  0:04.04 htop
1761 root      0  0 795M  784 292 5 0.0 0.0 0:31.03 /usr/sbin/opensm
2607 root      0  0 77M  5732 840 5 0.0 0.0 2:23.52 /usr/sbin/rsyslogd -n
1996 root      0  0 428M  456 956 5 0.0 0.0 1:13.62 /usr/sbin/irqbalance --foreground
F1 help F2 setup F3 save F4 file F5 raw F6 sort B7 file F8 file F9 kill F10 exit
```





# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



<https://www.top500.org/lists/>

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	<b>Frontier</b> - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, <b>HPE</b> DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,730,112	1,102.00	1,685.65	21,100
2	<b>Supercomputer Fugaku</b> - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, <b>Fujitsu</b> RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	537.21	29,899
3	<b>LUMI</b> - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, <b>HPE</b> EuroHPC/CSC Finland	1,110,144	151.90	214.35	2,942
4	<b>Summit</b> - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, <b>IBM</b> DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148.60	200.79	10,096
5	<b>Sierra</b> - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, <b>IBM / NVIDIA / Mellanox</b> DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94.64	125.71	7,438
6	<b>Sunway TaihuLight</b> - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, <b>NRCPC</b> National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93.01	125.44	15,371
7	<b>Perlmutter</b> - HPE Cray EX235n, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100 SXM4 40 GB, Slingshot-10, <b>HPE</b>	761,856	70.87	93.75	2,589



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



<https://www.r-ccs.riken.jp/en/fugaku/about/>



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



<https://www.ornl.gov/directorate/ccsd>



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



**Barcelona  
Supercomputing  
Center**  
*Centro Nacional de Supercomputación*

Marenostrum



165,888 procesadores

11.15 Petaflops

1 Petaflop =  $10^{15}$  operaciones por segundo!!

<https://www.bsc.es/>



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

### Red Española de Supercomputación: RES

81	<b>Flow</b> - PRIMEHPC FX1000, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu Information Technology Center, Nagoya University Japan	110,592	6.62	7.79	
82	<b>MareNostrum</b> - Lenovo SD530, Xeon Platinum 8160 24C 2.1GHz, Intel Omni-Path, Lenovo Barcelona Supercomputing Center Spain	153,216	6.47	10.30	1,632
83	<b>ONYX</b> - Cray XC40, Xeon E5-2699v4 22C 2.2GHz, Aries interconnect , HPE ERDC DSRC United States	211,816	6.32	7.46	
84	<b>LUMI-C</b> - HPE Cray EX, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, Slingshot-10, HPE EuroHPC/CSC Finland	194,560	6.30	7.63	1,216
85	<b>Titan</b> - Apollo 6500, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100 SXM4 80 GB, Mellanox HDR Infiniband, HPE SKT South Korea	56,544	6.29	7.19	

# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

### Red Española de Supercomputación: RES

		Cray Inc.				
28	DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	<b>Theta</b> - Cray XC40, Intel Xeon Phi 7230 64C 1.3GHz, Aries interconnect Cray Inc.	280,320	6,920.9	11,661.3	
29	Barcelona Supercomputing Center Spain	<b>MareNostrum</b> - Lenovo SD530, Xeon Platinum 8160 24C 2.1GHz, Intel Omni-Path Lenovo	153,216	6,470.8	10,296.1	1,632
30	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	<b>JUWELS Module 1</b> - Bull Sequana X1000, Xeon Platinum 8168 24C 2.7GHz, Mellanox EDR InfiniBand/ParTec ParaStation ClusterSuite Bull, Atos Group	114,480	6,177.7	9,891.1	1,361
31	NASA/Ames Research Center/NAS United States	<b>Pleiades</b> - SGI ICE X, Intel Xeon E5-2670/E5-2680v2/E5-2680v3 /E5-2680v4 2.6/2.8/2.5/2.4 GHz, Infiniband FDR HPE	241,108	5,951.6	7,107.1	4,407



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

Marenostrum: ejemplos de proyectos



ATMOSPHERIC COMPOSITION



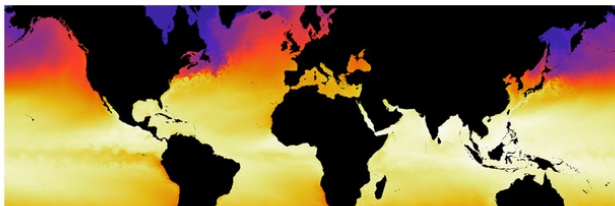
BIG DATA



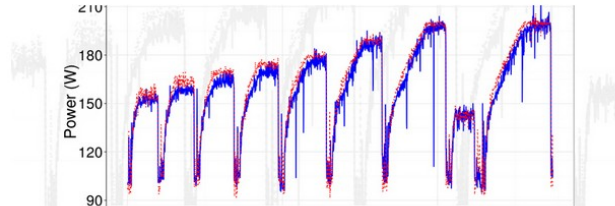
BIOINFORMATICS



BIOMECHANICS



CLIMATE PREDICTION



CLOUD COMPUTING

<https://www.bsc.es/research-and-development/research-areas>

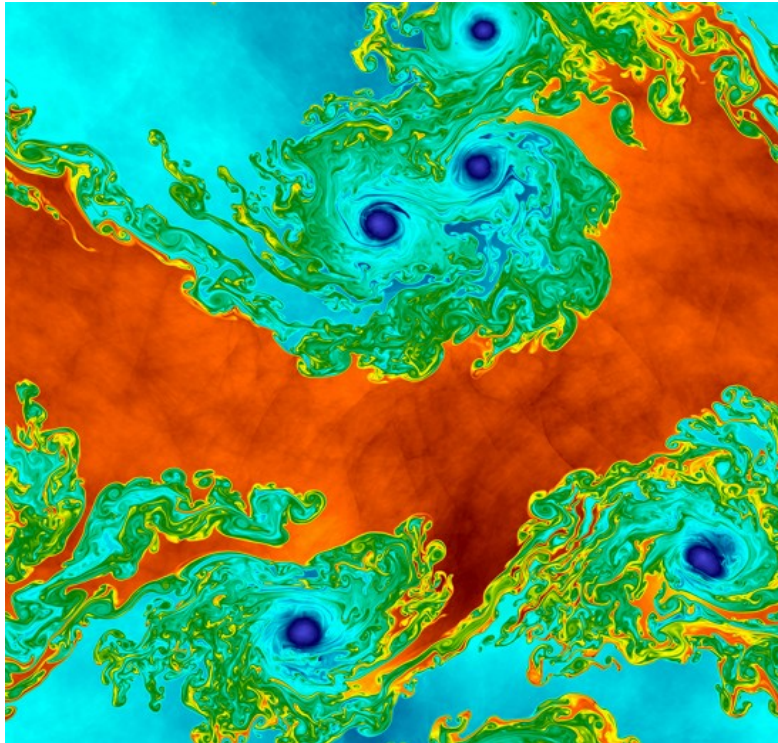




# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

Ejemplos de proyectos y aplicaciones



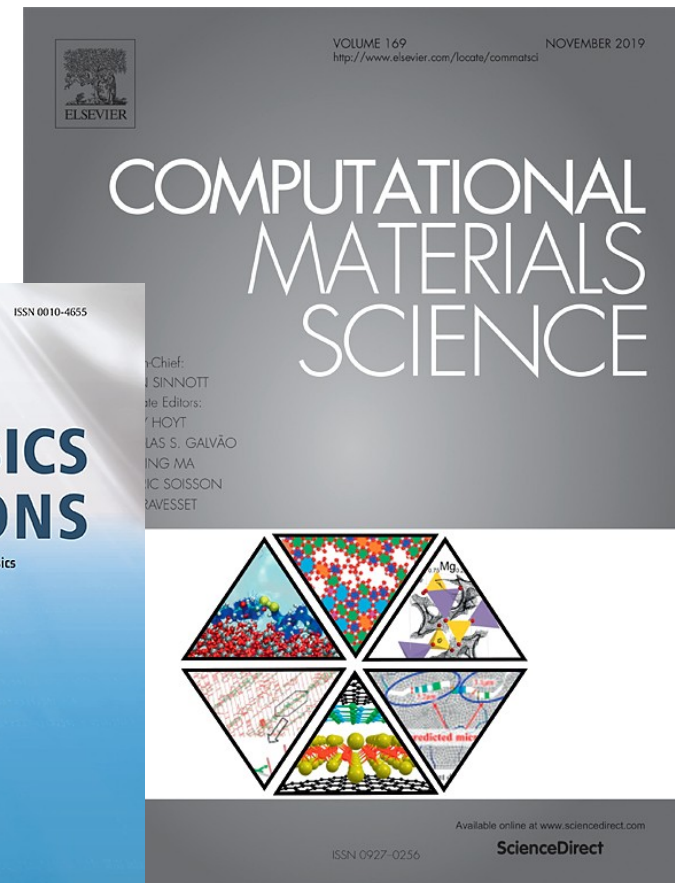
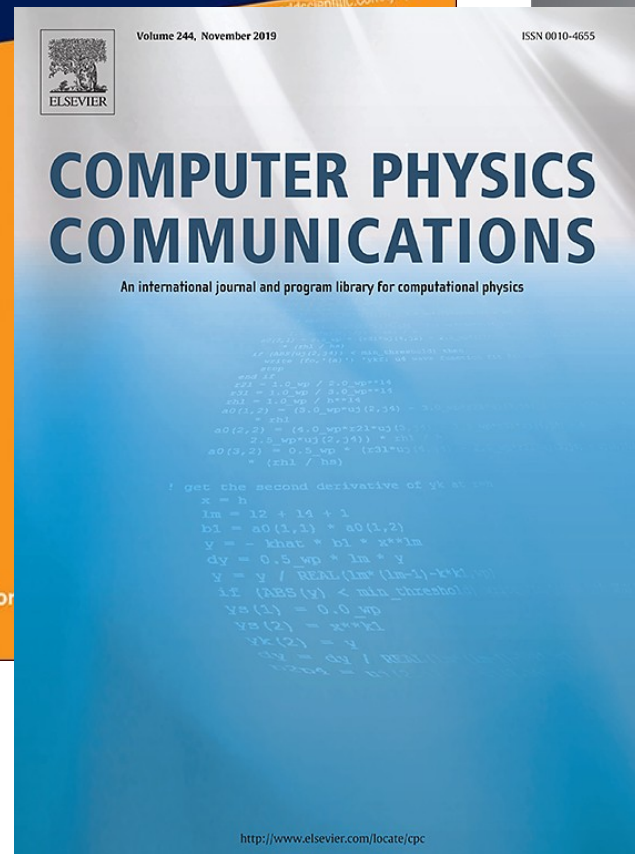
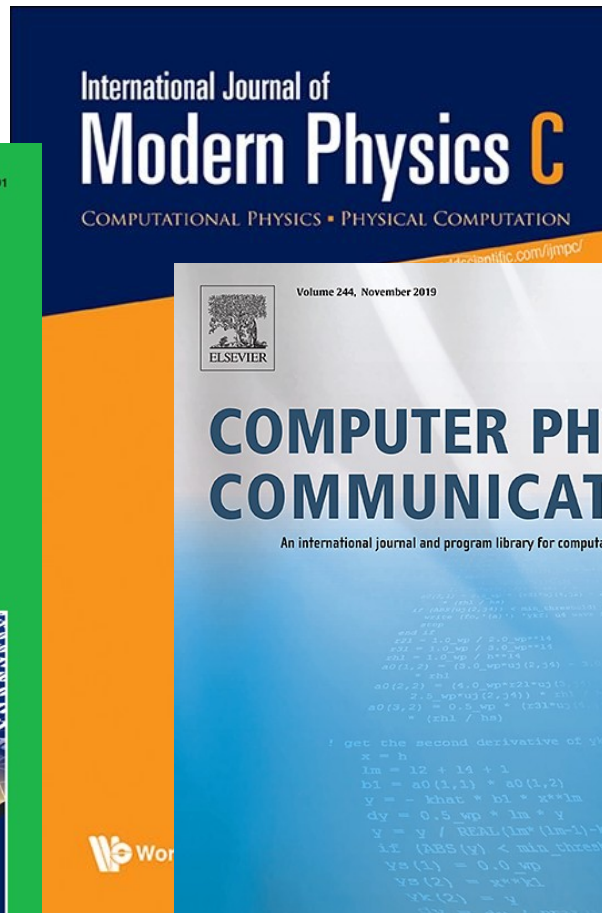
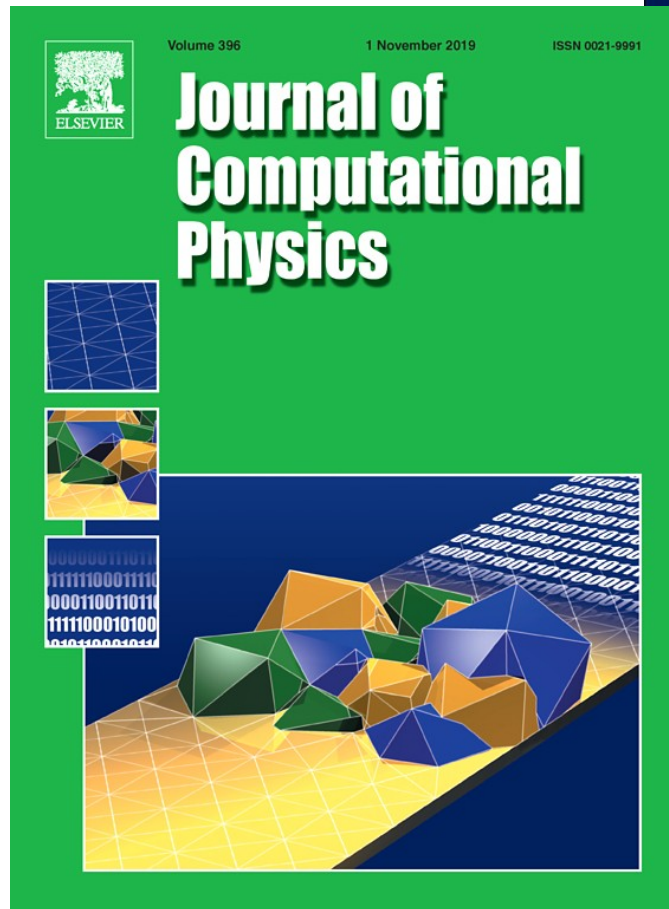
<http://iac3.uib.es/research/computer-applications/>





# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción



# Introducción a la modelización en Física

## Introducción

### Compañías de software para simulación de materiales

- **Accelrys:** [www.accelrys.com](http://www.accelrys.com) Software para farmacéuticas, químicas y ciencia de materiales
- **Synopsys** [www.synopsys.com](http://www.synopsys.com) Software para la industria de la microelectrónica
- **Gaussian, Inc.** [www.gaussian.com](http://www.gaussian.com)  
Cálculos de química cuántica
- **Molecular Discovery Ltd.**  
<http://www.moldiscovery.com>
- **Schrodinger, Inc.** <http://www.schrodinger.com/>

