

Simulaciones Computacionales

"GNM" <http://www.gnm.cl>

Universidad de Chile-Universidad Andrés Bello

Una aproximación al mundo desde sus cimientos

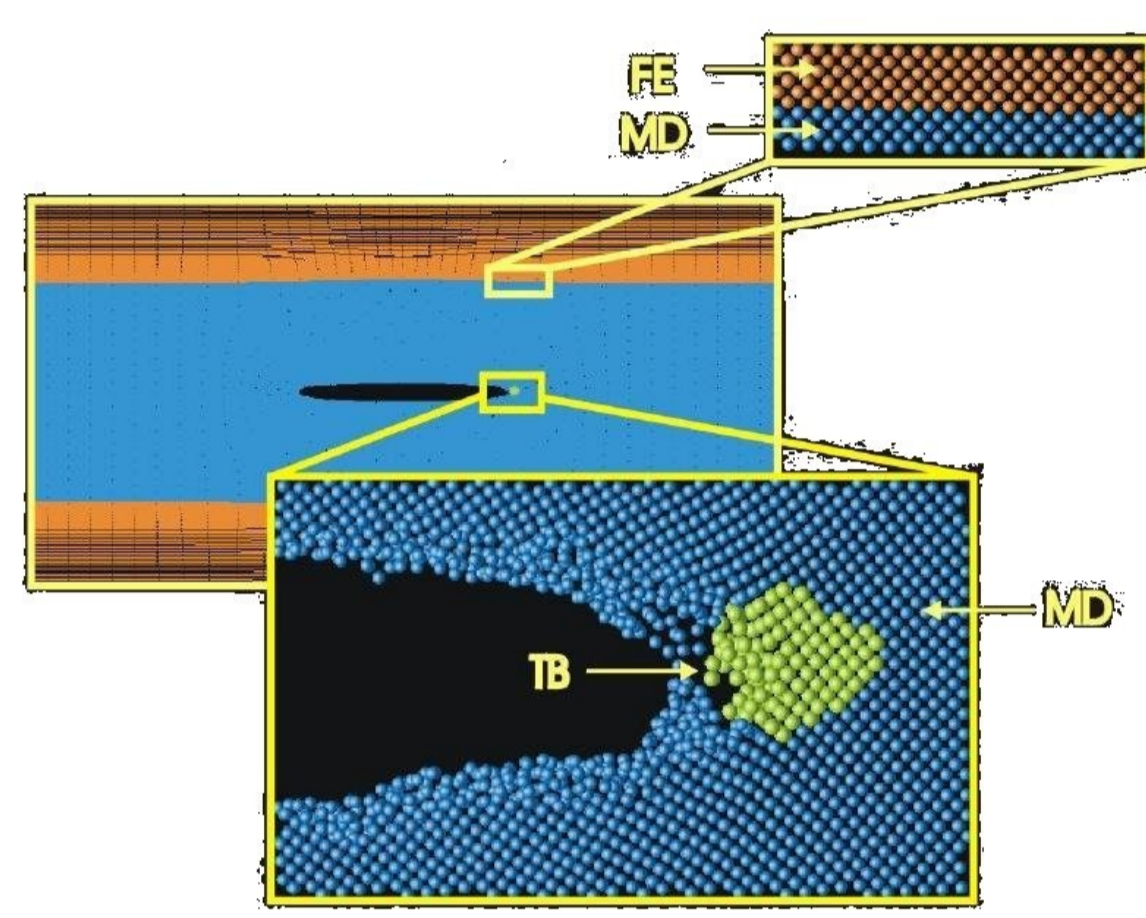


Las simulaciones computacionales han sido de gran importancia en la física desde los años sesenta. El gran incremento de la capacidad y cálculo computacional en los últimos años ha llevado consigo un sinnúmero de avances en muchas áreas de las ciencias. Así, la simulación computacional es hoy día un factor fundamental al momento de realizar investigación científica a gran escala.

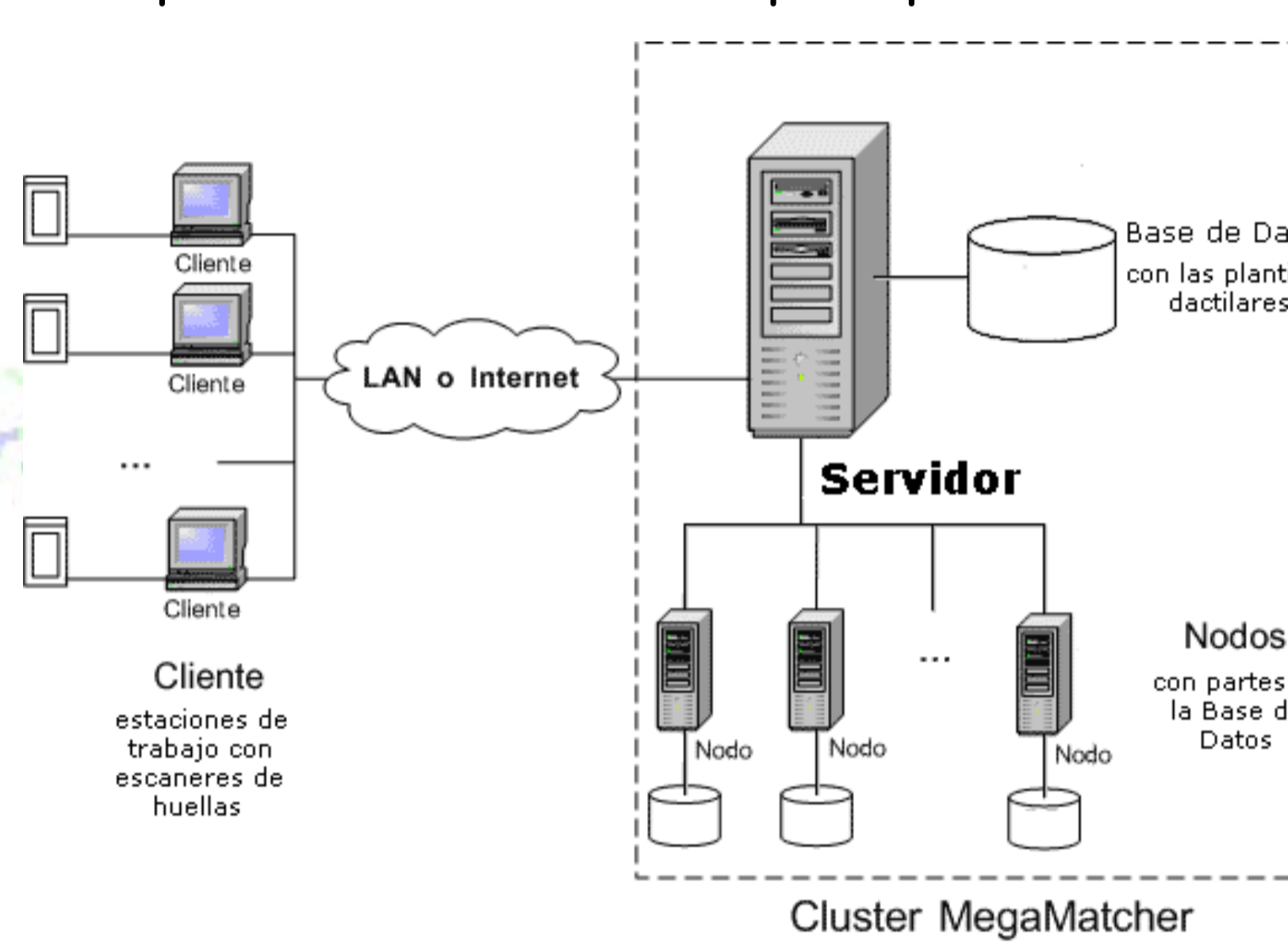
Simulaciones Computacionales

Por muchos científicos es considerada "una tercera metodología" a la investigación científica. Este método, de carácter complementario y muchas veces alternativo a los modos convencionales de hacer ciencia, el experimental y el teórico, ha ejercido un fuerte impacto en prácticamente todos los campos de la ciencia. El objetivo de la simulación computacional es resolver los modelos teóricos en su total complejidad, mediante la resolución numérica de las ecuaciones involucradas, haciendo uso intensivo (y extensivo) de computadores.

Los métodos de simulación computacional comúnmente usados para el estudio de las propiedades físicas de los materiales, son los de Dinámica Molecular, Método Montecarlo y Cálculos *ab-initio*.



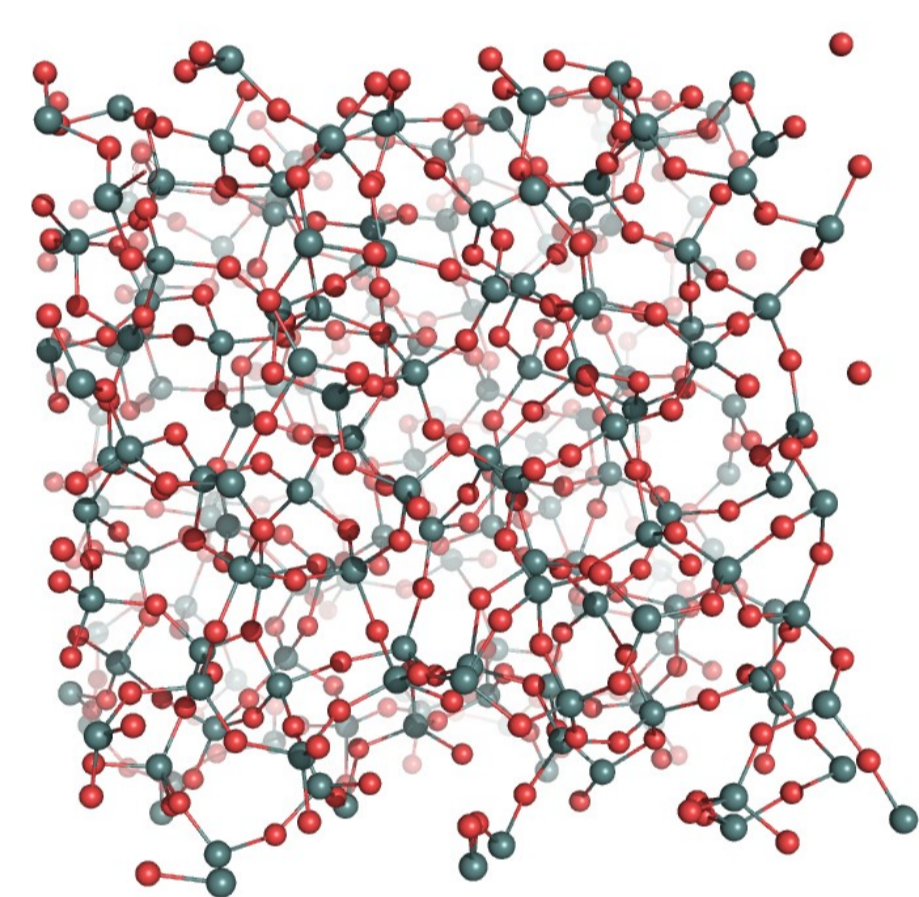
El gran obstáculo al trabajar con sistemas de miles y millones de partículas, es el tiempo de cálculo de las simulaciones computacionales. Estos pueden prolongarse por semanas y en algunos casos meses, incluso si el programa utilizado está muy optimizado. Por esta razón es que se crearon los cálculos en paralelo, los cuales consisten en repartir el cálculo de la simulación computacional en un cluster para optimizar el tiempo de cálculo. Un cluster consta de dos o más computadores (nodos) conectados a través de una red local, y éstos a la vez están conectados a un computador, llamado servidor, el cual posee una red remota para poder acceder desde



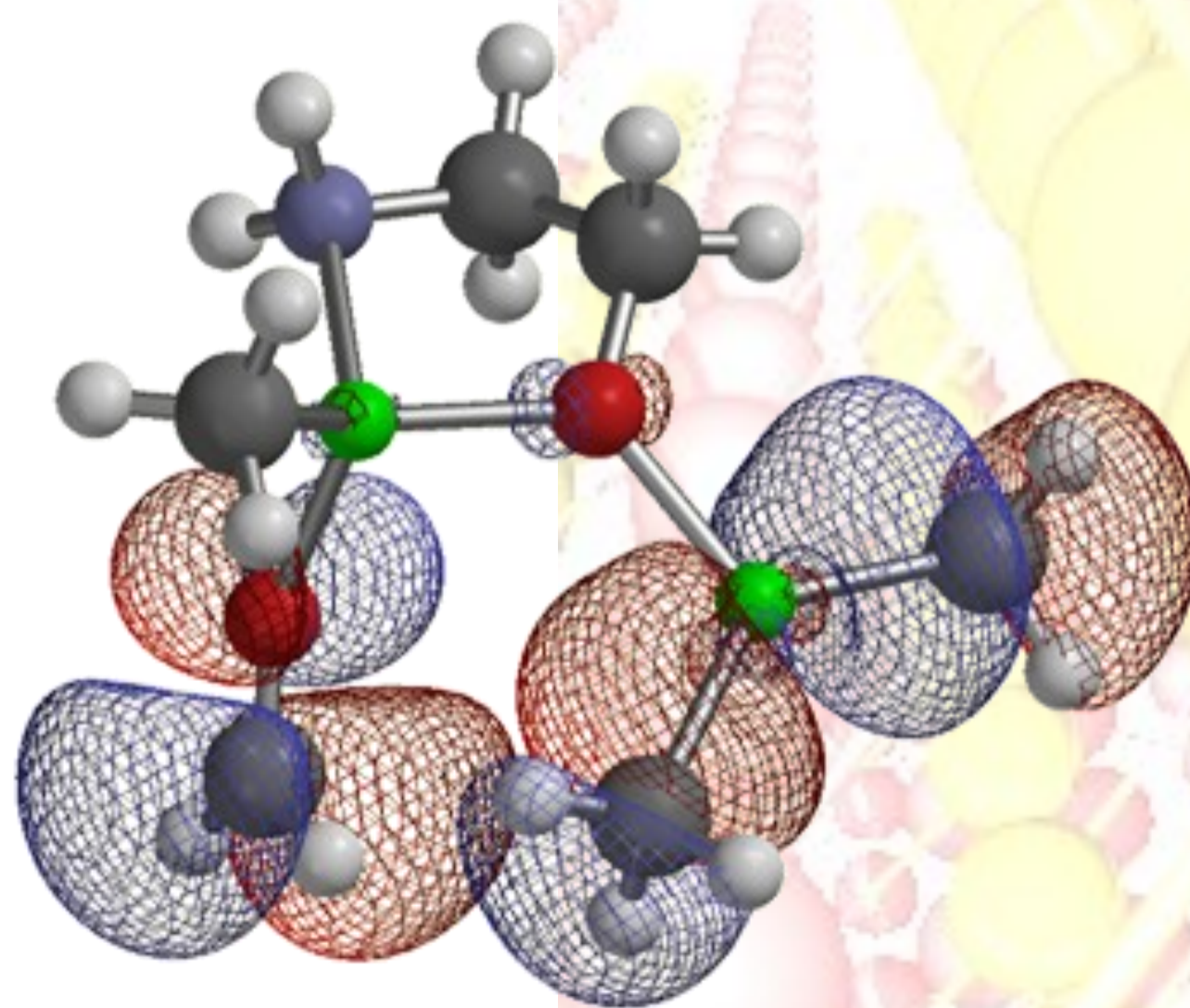
cualquier parte a través de internet o LAN. De esta manera un programa que esté paralelizado, es decir, que dentro de su código le asigne una parte de cálculo a cada nodo, podrá utilizar un cluster y así el tiempo de cálculo será mucho menor. Por esta razón muchos programas de Dinámica Molecular y Cálculos *ab-initio* han sido paralelizados para un mejor rendimiento.

Dinámica Molecular

Es un tipo de simulación computacional que considera un sistema de átomos o moléculas los cuales son tratados como un conjunto de partículas clásicas que interactúan unas con otras mediante un potencial interatómico. Debido a que en general los sistemas moleculares poseen un gran número de partículas, es imposible encontrar propiedades de tales sistemas complejos analíticamente. La simulación de Dinámica Molecular resuelve este problema usando métodos numéricos. Para obtener las trayectorias del espacio de fase del sistema (posiciones y velocidades de todos los átomos en todos los tiempos) se resuelven las ecuaciones de Newton numéricamente. Dentro de este esquema se pueden calcular propiedades elásticas, capacidad calórica, modos vibracionales, constantes de difusión, funciones de correlación y tantas otras que permiten una comparación directa con los experimentos.

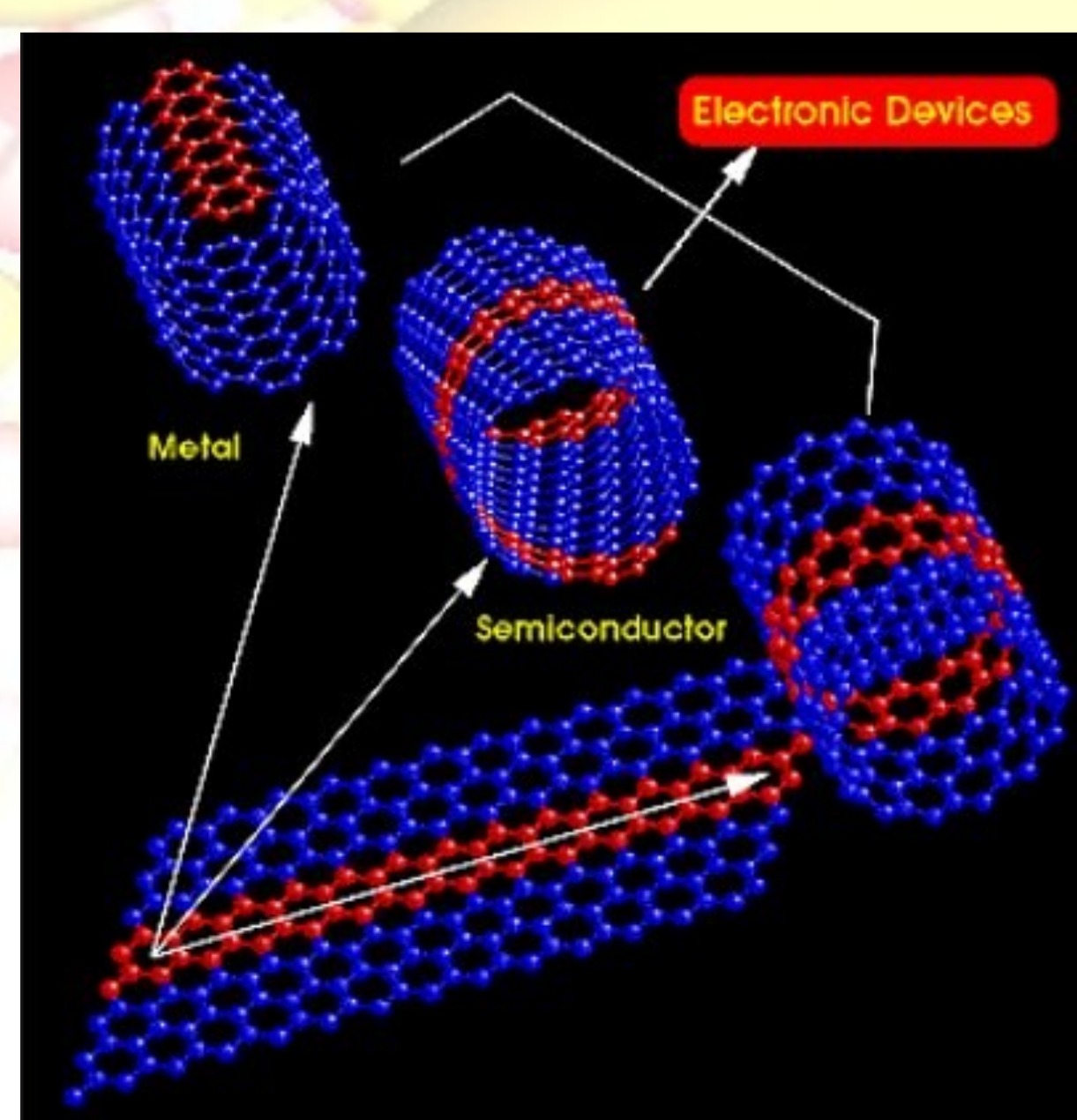


Cálculos *ab-initio*



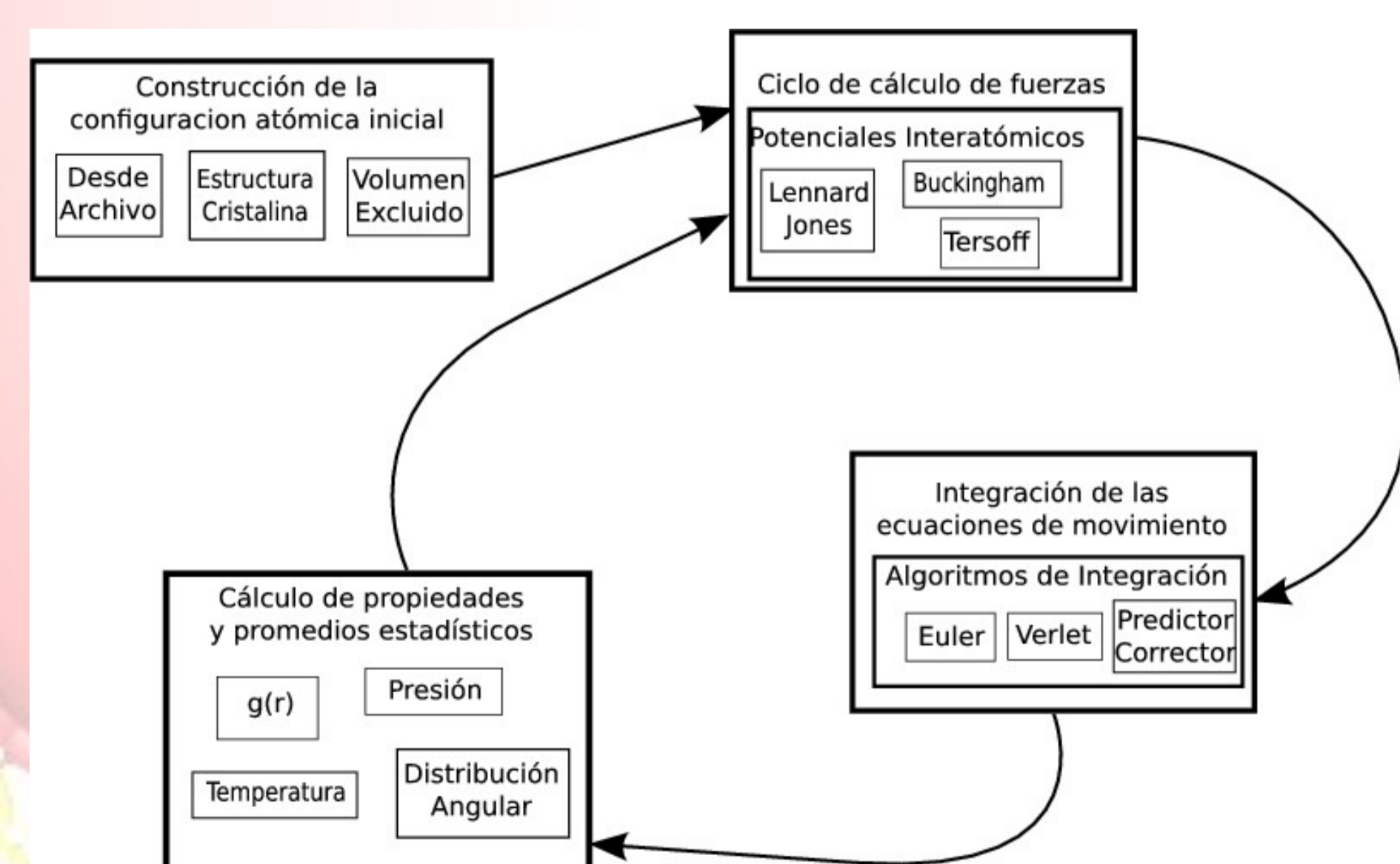
Este método considera que una molécula, o un sólido está compuesto por iones y electrones, agrupados de tal modo que forman enlaces entre ellos. Las propiedades físicas que caracterizan al sistema dependen de las diferentes interacciones entre sus componentes.

Estas interacciones son de carácter electrostático, y quedan descritas por la interacción ion-ion, ion-electrón y electrón-electrón. La mecánica que gobierna al sistema a nivel atómico es la mecánica cuántica, y lo que debe resolverse es la ecuación de Schrödinger.



Nuestro Código LPMD

Las Palmeras Molecular Dynamics es un código de dinámica molecular que se ha desarrollado en C++, haciendo éste lo más modular y multiplataforma posible, con la ventaja de ser controlado a través de plugins. Dentro de sus características está el ser un código Open Source, la implementación de plugins utilizando polimorfismo y sin duda un manejo de configuración amigable. Los resultados obtenidos mediante las primeras simulaciones han sido satisfactorios ya que han reproducido valores de simulaciones en nuevos y antiguos códigos de dinámica molecular.



Agradecimientos

Proyecto Anillo ACT/24
"Computer Simulation lab for nanobio systems"