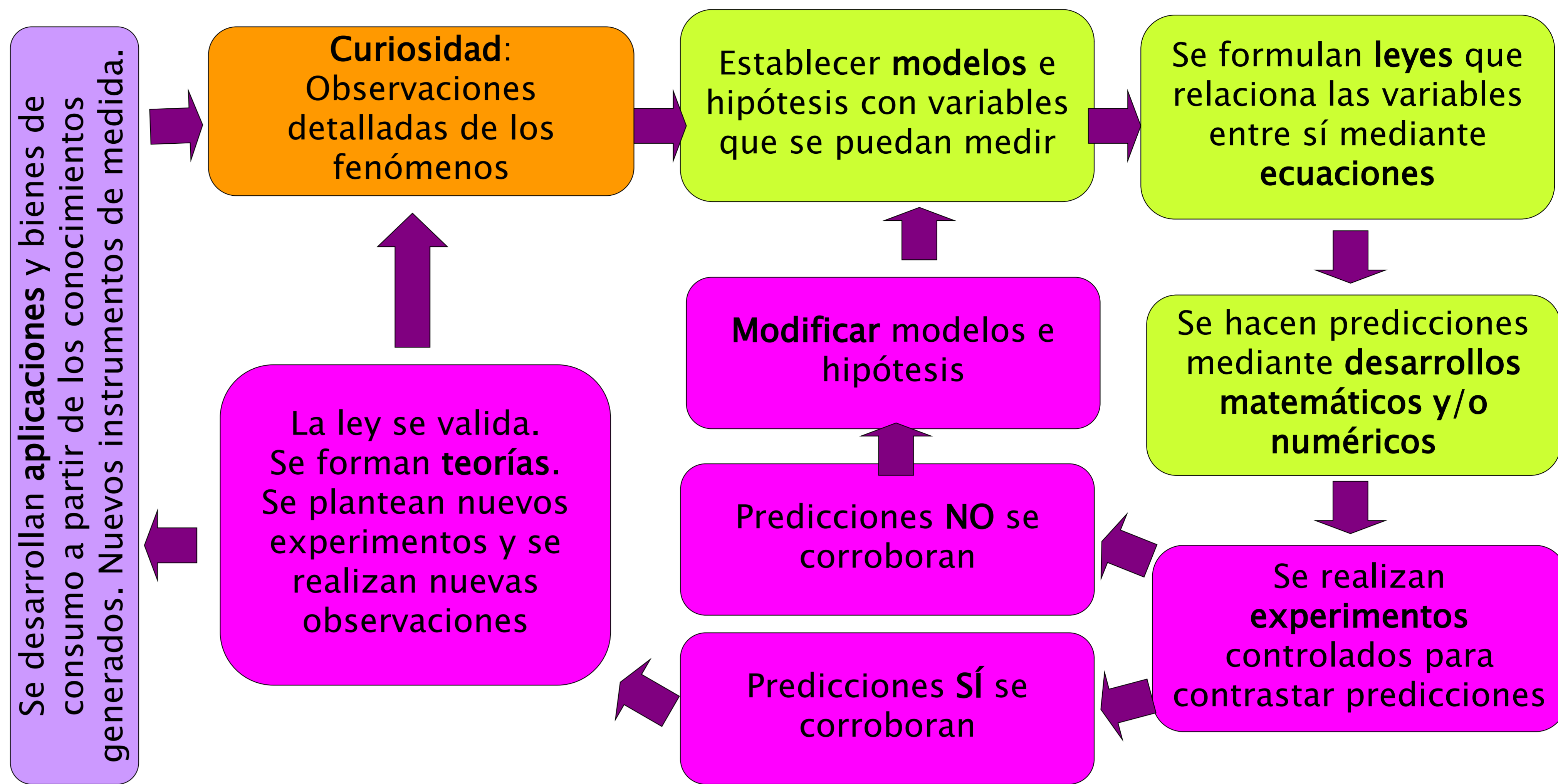


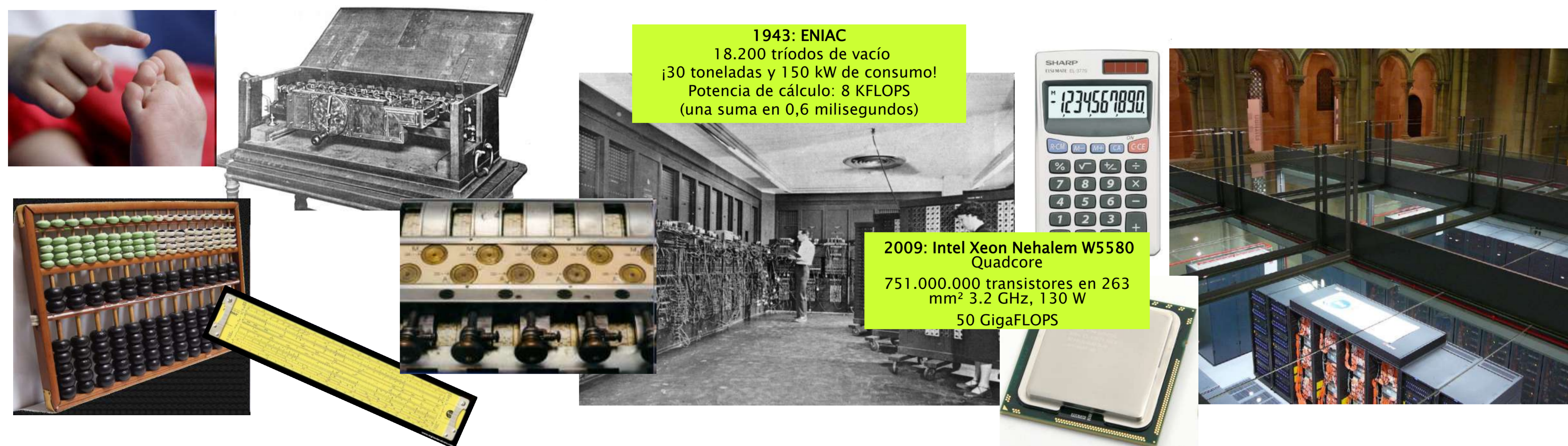
Grupo de Teoría / La simulación en ciencia de materiales

El método científico permite formular leyes que relacionan variables mediante el uso de ecuaciones. Dichas ecuaciones pueden resolverse de forma analítica en algunos casos pero en otros necesitamos la ayuda de algún instrumento que nos permita hacer complejos cálculos lo más rápidamente posible. De esta forma podemos predecir cosas que aún no han sucedido o explicar resultados de experimentos u observaciones.

Los instrumentos de cálculo han ido haciéndose más y más sofisticados. En el siglo XX se desarrollaron los computadores electrónicos que han ido haciéndose, de manera imparable, más y más potentes gracias a la posibilidad de miniaturizar los componentes electrónicos.



Teoría, Modelización y Simulación: elementos clave dentro del Método Científico

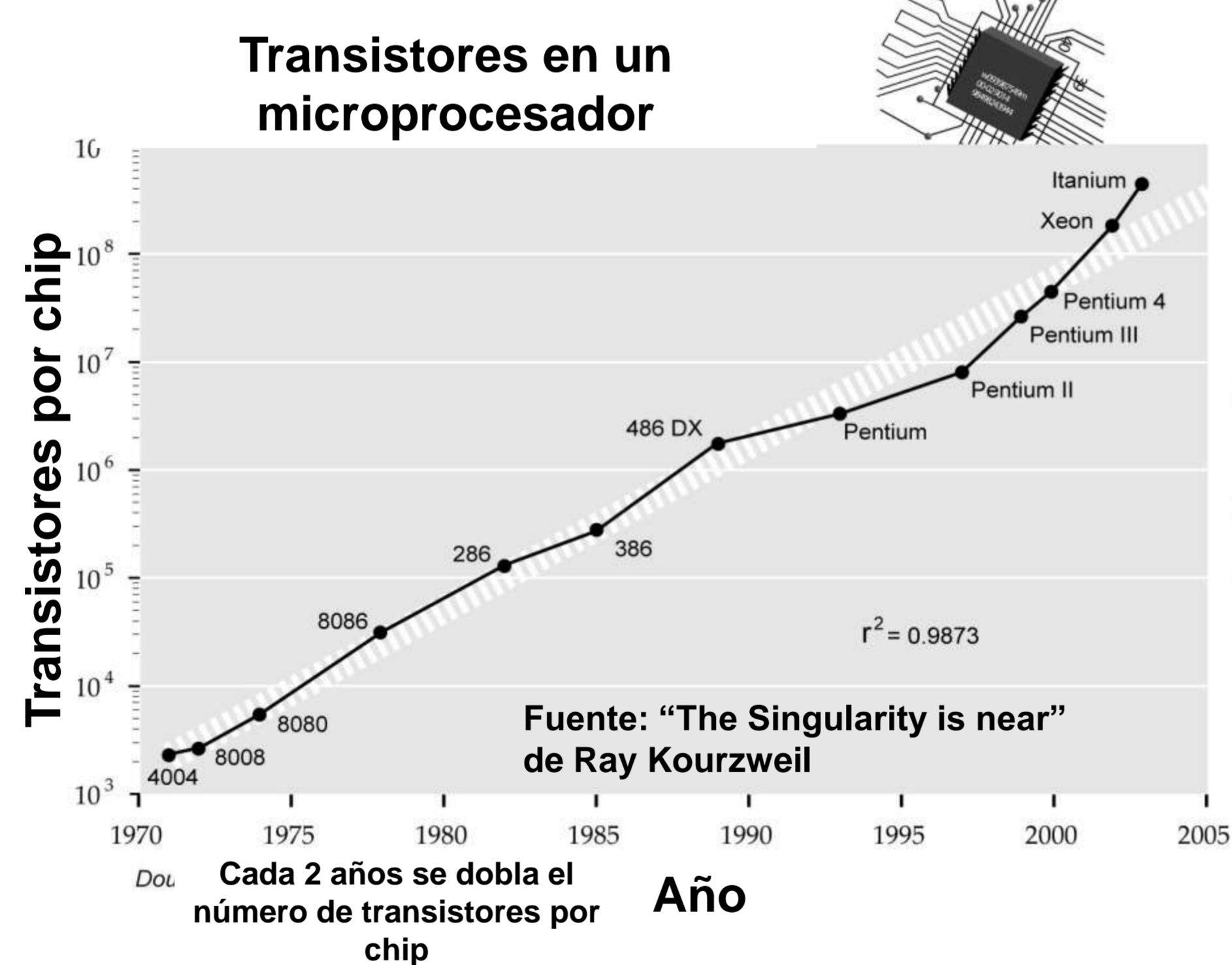


Herramientas de cálculo: dedos, ábaco, regla de cálculo, máquina de calcular de Leibniz, máquina diferencial de Torres Quevedo, primer computador electrónico ENIAC, calculadora de bolsillo, procesador Intel Xeon Nehalem W5580, Supercomputador "Mare Nostrum" del CNS de Barcelona.

¿Sabes que en el año 2011, el supercomputador "Sequoia" de IBM tendrá una potencia de 20 Petaflops (20×10¹⁵ Flops)? Todos los seres humanos tendríamos que ser capaces de efectuar a la vez más de 300.000 operaciones por segundo para tener la misma capacidad de cálculo.

El círculo virtuoso de la computación científica en la ciencia de materiales

El conocimiento de materiales nuevos o con propiedades mejoradas nos permite fabricar computadoras más potentes.



Potentes ordenadores y sofisticados programas nos permiten entender las propiedades de los materiales, ayudándonos a diseñar otros nuevos.

Las grandes ecuaciones de la Física. Según un artículo publicado en mayo de 2004 en la revista "Physics World", algunas de las siguientes ecuaciones son las más importantes de la Física.

Ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{D} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \partial \mathbf{D} / \partial t + \mathbf{J}$$

Ecuación de Newton: $\mathbf{F} = m \mathbf{a}$

Ec. de Schrödinger: $\mathbf{H} \Psi = E \Psi$

Ecuación de De Broglie: $p = h / \lambda$

Ley de Planck: $E = h\nu$

Muchas de estas son la que debemos resolver en nuestros computadores para entender cómo se comporta la naturaleza.

En el ICMM estudiamos el comportamiento de los materiales con la ayuda de nuestros clusters informáticos. Entre otras muchas cosas, queremos conocer cómo pasa la corriente a través de moléculas (a); las extrañas formas que adquieren los hilos diminutos (o nanohilos) (b); las vibraciones que aparecen en dichos nanohilos (c); la extraña propagación de la luz a través de combinaciones de rendijas, nanopartículas, defectos (d), etc.

