

# Formación en herramientas de cálculo científico en entornos distribuidos

Dirigido a estudiantes de Máster y 4º curso de Grados de Ciencias

Organiza:

- Grupo de Innovación Docente en Física
- Centro de Computación de Alto Rendimiento CCAR\_UNED

Patrocina:

- Plan de Apoyo a la Innovación Docente UNED
- Centro de Computación de Alto Rendimiento CCAR\_UNED
- Máster Universitario en Física de Sistemas Complejos

Información e inscripciones:

<http://ccar.uned.es/talleres-2022>

#SOMOS2030

[www.uned.es](http://www.uned.es)

UNED

Centro de  
Computación  
de Alto  
Rendimiento



# Formación en herramientas de computación científica en entornos distribuidos

---

30 NOVIEMBRE  
2021

## Introducción a la computación científica en entornos distribuidos

BRUNO es un clúster administrado por el CCAR que dispone de muchas herramientas de cálculo científico. En este taller introductorio se presentarán las características básicas de este clúster, similar a los que se encuentran en muchos sistemas de computación distribuida. En la parte práctica del taller se mostrará cómo realizar conexiones remotas, la subida y bajada de ficheros y cómo se realizan y monitorizan los cálculos enviados.

La familiarización con el flujo de trabajo de BRUNO es esencial para los talleres de Gaussian, LAMMPS o Siesta, por lo que se recomienda la asistencia de todos los estudiantes interesados en cualquiera de los demás talleres.

14 DICIEMBRE  
2021

## MATLAB

**MATLAB** es una plataforma de programación y cálculo numérico de gran popularidad entre ingenieros y científicos y usada en miles de centros académicos e institutos de investigación. Es una herramienta versátil adecuada para el análisis de datos, programar simulaciones y la resolución numérica de integrales, derivadas y ecuaciones algebraicas, diferenciales e incluso integrodiferenciales. Matlab es acrónimo de MATrix LABoratory ya que su lenguaje utiliza de modo natural la representación matricial y sus operaciones. Esto lo convierte en la herramienta más eficiente a la hora de implementar las ecuaciones desarrolladas por científicos y matemáticos en forma de programas.

En este taller se aprenderá mediante ejemplos sobre las funcionalidades básicas de Matlab para la realización de cálculos con matrices, cálculo numérico como derivadas, integrales o ecuaciones diferenciales, simulaciones de procesos aleatorios, etc. Se pondrá especial énfasis en la vectorización de los cálculos que permite escribir códigos mucho más compactos y eficientes computacionalmente. Es de especial interés para todos aquellos estudiantes que precisen una herramienta para analizar datos, realizar representaciones gráficas o cálculo numérico, y muy recomendable para los que cursen asignaturas relacionadas con estas destrezas como "Introducción a la Ciencia y el Análisis de Datos" o "Teoría de la Información".

ENERO  
2022

## LAMMPS

**LAMMPS** es un programa de dinámica molecular ampliamente usado en la comunidad científica. Con una sintaxis propia, está especializado en problemas de estado sólido (metales, semiconductores), materia blanda (biomoléculas, polímeros) y modelos mesoscópicos. Puede usarse para modelar interacciones atómicas o, de forma más general, como un simulador en las escalas atómicas, mesoscópicas o del continuo. En este taller veremos, a través de ejemplos sencillos, las características generales de LAMMPS, cómo interactuar con él y usarlo para resolver problemas de dinámica molecular o de dinámica browniana.

Este taller se recomienda especialmente a estudiantes de la asignatura “Fenómenos de Transporte” y TFM del Máster en Física Avanzada. También es recomendable para estudiantes de TFG de la línea “Dinámica molecular para resolver problemas en física”.

MARZO  
2022

## RandomPhase

**Random Phase** es un programa de simulación desarrollado por Personal Docente e Investigador de la UNED con fines tanto didácticos como de investigación. Emplea el método de Metropolis Monte Carlo (MMC) para obtener propiedades de equilibrio (presión, concentración, energía, correlación espacial, ...) de sistemas de partículas que interactúan a través de potenciales específicos, los cuales pueden ser determinados por el usuario dependiendo de las características del sistema.

Este programa se ha utilizado para realizar una de las prácticas del Laboratorio de Estado Sólido de Técnicas Experimentales IV del grado de Física, así como para comprender los fenómenos que desencadenan ciertas transiciones de fase en sistemas bidimensionales. Sin embargo, la utilización de este tipo de software puede ser de interés para todos aquellos estudiantes interesados en estudiar sistemas complejos, en los cuales la solución analítica puede llegar a ser inabordable o necesite algún tipo de corroboración.

En el taller los asistentes podrán entender qué tipo de sistemas pueden ser simulados mediante esta técnica (MMC), los resultados que podemos obtener, las ventajas que puede suponer su uso sobre otros tipos de simulación, así como el aprendizaje y manejo de las principales características del software Random Phase.

ABRIL  
2022

## Gaussian

**GAUSSIAN** es un programa de cálculo molecular, principalmente enfocado al denominado cálculo ab initio, de gran uso por parte de la comunidad científica, especialmente entre químicos, bioquímicos y físicos. Está principalmente orientado a cálculos en el equilibrio de especies moleculares de tamaño medio, donde bajo el paraguas de las leyes fundamentales de la mecánica cuántica, se incorporan un gran número de métodos computacionales propios de la química cuántica. El usuario puede no solo predecir de manera fiable las geometrías moleculares de las especies, sino también resolver problemas químicos como la búsqueda de estados de transición, espectros vibracionales, estados excitados, superficies de potencial, etc.

Este taller se recomienda especialmente a estudiantes de la asignatura “Métodos Cuánticos en Sistemas Poliatómicos” y TFM del Máster en Física Avanzada.

MAYO  
2022

## Siesta

**Siesta** es uno de los programas ampliamente utilizados en la investigación en campos de la Física de la Materia Condensada y la Química Cuántica. Siesta realiza cálculos eficientes, basadas en la teoría del funcional de la densidad, de estructura electrónica y simulaciones de dinámica molecular tanto de moléculas como de sólidos. En este taller veremos cómo utilizar siesta para determinar las propiedades estructurales y electrónicas de diferentes sistemas mediante su aplicación a ejemplos sencillos.

Este taller se recomienda especialmente a estudiantes de TFM del Máster de Física Avanzada.