





Instituto de Estructura de la Materia - Ciclo de Seminarios 2014-2015 Seminario del Departamento de Física Macromolecular

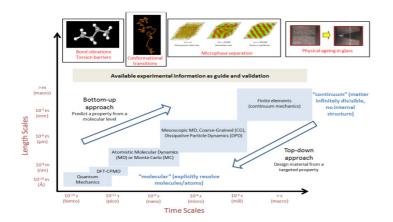
MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN MULTIESCALAR EN FÍSICA

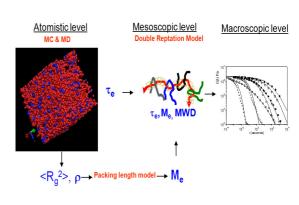
Dr. Javier Ramos Díaz Departamento de Física Macromolecular IEM/CSIC

El diseño asistido por ordenador combina las leyes físico-químicas con los avances en ciencias de la computación para racionalizar la investigación y desarrollo (I+D) de sistemas físicos. Estas técnicas de modelización por ordenador permiten comprobar predicciones teóricas y comprender los comportamientos complejos de los sistemas bajo estudio.

Estos problemas, generalmente, presentan características interesantes en intervalos de espacio y tiempo dispares constituyendo una escala jerarquizada. Esta jerarquía es difícil de capturar usando un solo método de simulación por lo que se hace necesario la modelización multiescalar usando métodos apropiados para cada escala. El gran progreso, durante estos últimos años, se ha debido a la conexión entre las distintas escalas espaciotemporales de modelos que originalmente se han usado de forma aislada.

En este seminario, se introducirán los métodos computacionales más relevantes en cada una de las escalas (electrónica, atómicas y mesoescala). Asimismo, se discutirá el comportamiento multiescalar de sistemas macromoleculares.





Viernes, 13 de Marzo de 2015, 12:00 horas.

Sala de Conferencias. Centro de Física "Miguel A. Catalán".

Serrano, 121. 28006 Madrid.