Simulación molecular de sistemas complejos

Reporte de recursos de supercómputo 2016

Dra. Beatriz Marcela Millán Malo
Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada
UNAM, Campus Juriquilla, Querétaro, México

Adelantos en los proyectos de investigación

1. Azul Maya

Se terminó de escribir la tesis del alumno Israel Yépez Espinosa, titulada *Estudio de mezclas binarias en canales de la Paligorskita* la cual está en revisión y se espera que se titule durante 2017. Después de esto se espera continuar con el proyecto con algún otro estudiante que le dedique el tiempo para realizar más cálculos y programar en paralelo como era la idea original pero debido a la falta de studiantes no ha sido posible.

2. Simulación de patrones de vegetación

Se continuó con el proyecto del estudio de la formación de patrones de vegetación en zonas semi-áridas por medio de simulaciones Monte Carlo. En primera estancia se trató de reproducir los resultados obtenidos por los autores Meyra et al. 2012[1] en el ensamble Gran Canónico. Debido a que este sistema utiliza muchos recursos de memoria y tiempo de cpu es necesario pasar el modelo a cómputo en paralelo. Para continuar el estudio se trabajó el modelo en Ensamble Canónico repoduciendo los resultados de Sear et al. 1999[2]. Una vez que el programa se corroboró se propuso un modelo para estudiar la organización de la vegetación en un área estrecha cercana a una línea rica en recursos para simular una ladera cercana a un río. Los resultados obtenidos con este modelo se presentaron en dos congresos los cuales se mencionan a continuación y también se adjuntan los trabajos.

Trabajos presentados en congresos

1. *Distribución de la vegetación en zonas semi-áridas con variablidad de recursos"*, B. Millán-Malo, A. Balderas-Paredes y M. Trejo Arellano, **LIX Congreso Nacional de Fśica**, realizado del 2 al 7 de octubre de 2016, León, Guanajuato, México

2. *Simulación computacional de la distribución vegetacional en zonas semi-áridas con variablidad de recursos"*, M. Trejo Arellano y B. Millán-Malo, **XV Coloquio de Tecnología**, realizado 6 y 7 de diciembre de 2016, UNAM, Campus Juriquilla

[1] A. G. Meyra, G. J. Zarragoicoechea, V. A. Kuz. *Vegetation patterns in limited resource ecosystems: a statistical mechanics model and Monte Carlo simulation*, Molecular Physics, 2012, **11** (3) 173-178

[2] R. P. Sear, S. W. Chung, G. Markovich, W. M. Gelbart, J. R. Heath, *Spontaneous pattering of quantum dots at the air water interface* 1999, **59** (6) S3769-S3789