



Centro de Investigaciones Hidráulica e Hidrotécnicas

Proyecto FID2016-275

“TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA HPC: ESTUDIO DE LOS ASPECTOS A NIVEL ATÓMICO DE LOS EFECTOS QUE SE PRODUCEN EN LOS MATERIALES DEBIDO A LA IRRADIACIÓN CON LÁSERES E IONES”

Investigador principal: Dr. ¹Reinhardt Pinzón

Investigadores colaboradores: Dr. ²Abdiel Pino, Dr. ³Javier Sánchez Galán, Dr. ⁴Manuel Ujaldón, Dr. ⁵Herbert Urbassek, Lic. ¹Felipe Rivera, Ing. ¹Alejandrina Batista

¹Centro de Investigaciones Hidráulica e Hidrotécnicas (CIHH)

²Universidad Tecnológica de Panamá (UTP), Facultad de Ciencia y Tecnología

³Centro de Producción e Investigaciones Agroindustriales (CEPIA), UTP

⁴Universidad de Málaga, España

⁵Universidad de Kaiserslautern, Alemania

Apartado 0819-0789, Panamá, República de Panamá

e-mail: cihh@utp.ac.pa <http://www.cihh.utp.ac.pa>

Resumen

La ejecución de este proyecto conlleva el desarrollo e implementación de códigos en CUDA para acelerar computación científica en procesadores gráficos (*GPUs, Graphics Processing Units*), aportando computación de altas prestaciones y propósito general. Una vez, perfeccionado este sistema **computacional de alto rendimiento (HPC, por sus siglas en inglés: High Performance Computing)**, se estudiará por medio de simulaciones atómicas asistidas por computadoras (en particular, simulaciones de dinámica molecular) los fuertes efectos de no equilibrio que ocurren después que un sólido es irradiado con intensos haces ya sea de láseres o de iones. Entre los principales impactos que este proyecto tendrá sobre la base científica del país podemos mencionar: la creación de un sistema nacional de tecnologías informáticas de computación de alto rendimiento que sentarán las bases para la consecución en nuestro país de un Centro de Investigación y Simulación Asistida por Computadoras a diferentes escalas y fenómenos en la materia condensada, ciencias de los materiales, bioinformática, ecohidrología, cambio climático y sus aplicaciones - con proyecciones nacionales e internacionales, y finalmente la unificación sinérgicas entre el *know how* y el *show how* – es decir un camino de interacción entre industria y el sector académico a través del perfeccionamiento creciente de una expertise científica técnica partiendo desde una perspectiva nacional.

Resultados de la Etapa I

1. Insumos científicos adquiridos.
2. Memoria de información bibliográfica realizada.
3. Foto documentación del lanzamiento del proyecto y del seminario taller.
4. Documentación de reuniones de coordinación realizada.
5. Base de datos de la construcción de las herramientas informáticas: hardware y software.
6. Guía sistemática que contenga los diferentes pasos del verificado y referenciado basados en los códigos estables de simulación de Dinámica Molecular y de Monte Carlo.
7. Informe sobre pasantía realizada a la Universidad de Kaiserslautern.
8. Base de datos del estudio en la formación de la topografía de la superficie bajo impacto.
9. Informe técnico y financiero de la Etapa I entregado a la SENACYT.

Resultados de la Etapa II

1. Insumos científicos adquiridos.
2. Foto documentación de reuniones de coordinación realizada.
3. Base de datos del estudio de la capa fina free-standing metal y la superficie de Nano-estructuras completadas.
4. Caracterizaciones morfológicas y estructurales realizadas.
5. Borrador de manuscrito científico sometido a una revista indexada.
7. Foto documentación de los resultados presentados del proyecto en seminarios, actividades científicas y en la página web de la UTP www.hpc-simulations.utp.ac.pa.
8. Informe técnico y financiero de la Etapa II e informe final entregado a la SENACYT.