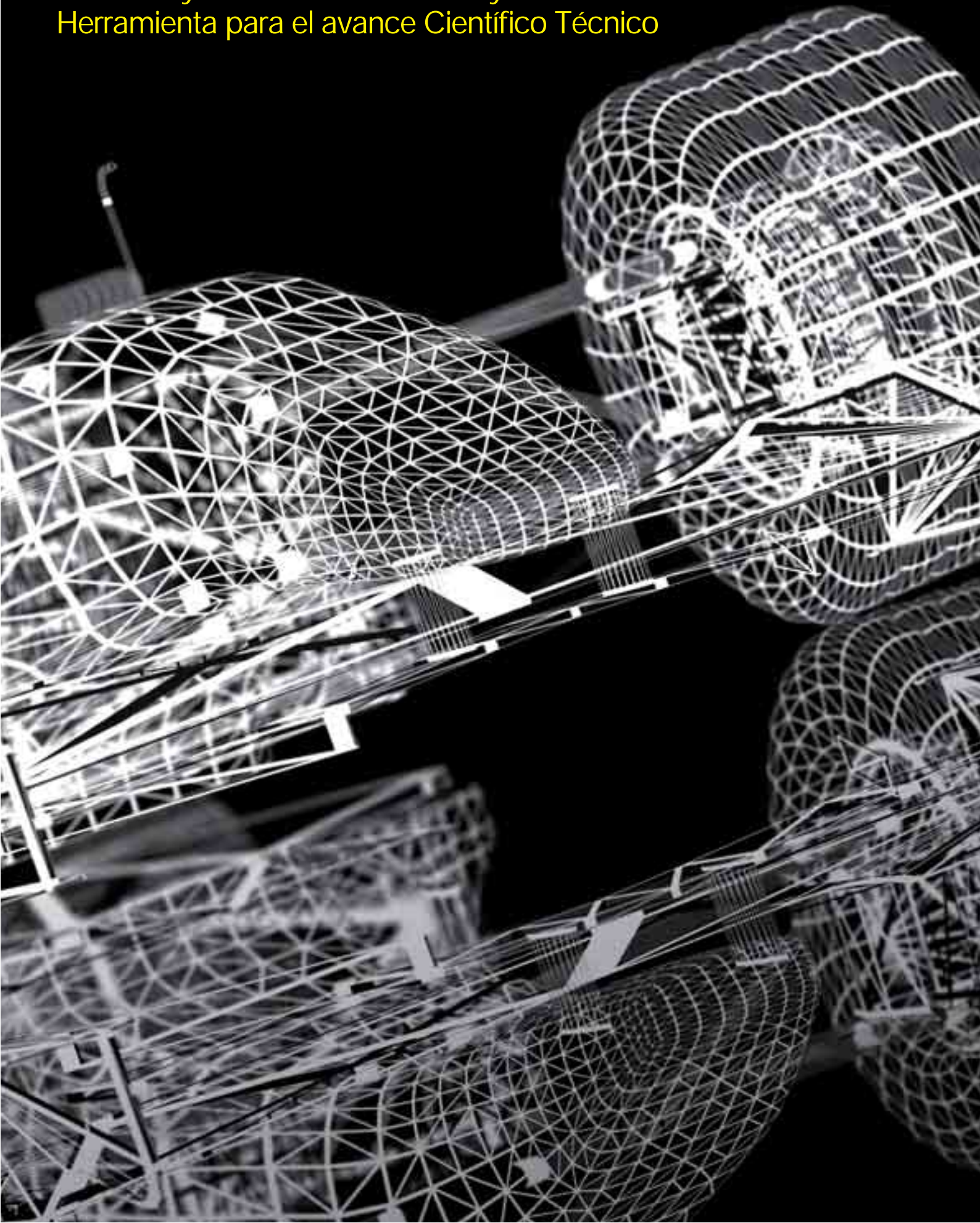


Computar para competir

Creación y Uso de Simulaciones y Modelos Numéricos
Herramienta para el avance Científico Técnico



Simulación numérica: la supercomputación al servicio de

La simulación y la modelización numérica son técnicas basadas en el cálculo que se utilizan de forma generalizada desde los años 60 en una amplia gama de campos de conocimiento para validar modelos conceptuales de procesos u objetos observados. Esto supone, en la actualidad, la posibilidad de reproducir y representar de forma virtual procesos que sería muy complicado y caro o incluso imposible probar de forma real.

Las simulaciones numéricas implican con frecuencia cálculos de gran envergadura por la ingente cantidad de datos que necesitan relacionar. Por este motivo, se llevan a cabo mediante recursos computacionales que, en el caso de la ciencia y la industria, suponen el uso de ordenadores conectados en red para sumar grandes capacidades de cálculo y, sobre todo, de supercomputadores, dotados con un gran número de rápidos procesadores que trabajan en paralelo. Dado que estos son cada vez más potentes y veloces, la eficiencia y aplicaciones de la simulación numérica evolucionan a un ritmo muy elevado.

La simulación es un valioso recurso para recrear situaciones que los métodos experimentales no pueden reproducir, a menudo por implicar a entidades u objetos demasiado pequeños o grandes. La ciencia que trabaja con sistemas nanométricos o la industria que necesita hacer pruebas sobre enormes instalaciones utilizan supercomputadores como el Finis Terrae para simular de forma gráfica funcionamientos, efectos, comparaciones, mejoras, etc. mediante operaciones de cálculo intensivo. Normalmente, los datos de entrada son una enorme cantidad de cifras y los de salida una figura o una secuencia de ellas, una gráfica, una ani-

de la ciencia y la industria

Crear modelos y validarlos

La simulación numérica también se llama modelización porque su secreto está en dar lugar a modelos virtuales que facilitan y aportan valor al trabajo en la ciencia y la industria dado que:

1

ayudan a comprender mejor la realidad > valor de comprensión.

2

ayudan a predecir el comportamiento en diferentes situaciones > valor de predicción.

Para cumplir estas misiones, el modelo debe reunir dos requisitos:

1

incorporar todas las variables que de modo significativo influyen en el sistema.

2

estar construido a una escala que aporte información útil.

3

A estos dos se suma un tercero siempre que la situación de referencia lo permita:

ser validado a nivel experimental para comprobar que la simulación ha arrojado datos útiles.

Un ejemplo claro de esto lo vemos en la industria de la automoción. Los fabricantes de coches usan la simulación computacional para probar los sistemas de seguridad de sus nuevos diseños. Dando lugar a una recreación virtual del vehículo (el modelo) pueden ahorrarse los cientos de miles de euros que serían necesarios para construir un prototipo y testarlo. Mediante esta tecnología, los ingenieros pueden analizar al milisegundo los efectos predichos de cada condición aplicada al modelo en cada una de sus secciones. Una vez que el modelo está lo más perfeccionado posible a nivel virtual, se realiza una validación experimental con un prototipo físico.



Problemas científicos e industriales

El sistema real **todavía no existe** y construir un prototipo tiene unos costes económicos y de tiempo prohibitivos o entraña riesgos.

El sistema es **imposible de construir** físicamente.

El **sistema real existe** pero experimentar con él es demasiado costoso, arriesgado y poco operativo.

La **predicción** es un factor necesario para analizar procesos a largo plazo en formatos manejables.

Soluciones con base en la simulación

modelos para construcción de aviones, diseño de reactores nucleares, planificación de sistemas de producción...

modelos para estudio de sistemas biológicos, análisis de modelos económicos...

modelos para planificación de cambios en el sistema de manejo de equipaje en un aeropuerto, en cadenas de distribución, en unidades militares...

modelos para estudio del crecimiento de la población, sobre la propagación de incendios forestales o de epidemias de gripe, proyección de planes urbanísticos...

Las simulaciones computacionales son de uso cada vez más común en los ámbitos de la ciencia y la tecnología, pero también del entretenimiento y de la planificación financiera y empresarial.

mación o cualquier otra representación que ayuda a visualizar los resultados del cálculo, realizado con base en complejos algoritmos matemáticos. De ahí que gracias a la supercomputación se haya podido recrear desde el desplazamiento de las ondas sísmicas por todo el mundo hasta el comportamiento de un líquido a nivel atómico.

La simulación permite a científicos e ingenieros tratar de encontrar soluciones a problemas en el sentido de hacer posible la predicción del comportamiento de un sistema a partir de un conjunto de parámetros y condiciones iniciales. Esto permite saber de antemano, por ejemplo, las limitaciones en el rendimiento y los posi-

bles defectos en el uso a largo plazo de equipamientos simulando en horas o días de cálculo el paso de años o décadas y sus efectos sobre el objeto o sistema de referencia.

Las simulaciones numéricas obtenidas mediante el uso de supercomputadores se han convertido en una parte fundamental de la modelización matemática necesaria para el desarrollo de la Física, la Astrofísica, la Química, la Biología, la Economía, la Psicología, la Sociología y la Ingeniería. En todas estas especialidades, la capacidad de la simulación computacional ha excedido hasta los límites de lo imaginable a las modelizaciones numéricas que antes se hacían con lápiz y papel.



¿Quién usa estas herramientas?

La comunidad académica

Investigadores científicos: son los artífices de la llamada ciencia básica –la que tiene como principal cometido generar conocimiento– y también de la ciencia aplicada –concebida para resolver

problemas prácticos–. En investigación científica básica y aplicada la simulación está presente en todas las disciplinas como medio complementario e incluso alternativo a la experimentación.

La resolución de modelos matemáticos mediante algoritmos matemáticos y potentes ordenadores se considera hoy el tercer pilar del método científico, junto con la teoría y la experimentación.

©iStockphoto.com/DavidMarchal

La industria

Empresas: son las que generan valor a partir de los resultados de la investigación aplicada convirtiéndolos en innovación y explotándolos comercialmente. En la actualidad existe un alto grado de relación entre innovación y simulación numérica.

Esta última se utiliza en la industria para diseñar los productos y planificar su fabricación, optimizándolos para hacerlos más funcionales y reducir sus costes. Además, facilitar la experimentación virtual permite reducir el tiempo que transcurre

entre la concepción y la comercialización, aspecto clave para la competitividad empresarial, ya que hay que tener en cuenta que el 80% del coste del producto se concentra en tan sólo el 20% del tiempo invertido en su desarrollo.

©iStockphoto.com/JoséLuisGutiérrez

¿Un mundo sin límites?

Las posibilidades abiertas por la simulación numérica se han multiplicado exponencialmente en la última década. En 2005 daba comienzo el macroproyecto internacional 'Blue Brain', con el objetivo de crear la primera simulación del cerebro humano completo mediante el supercomputador Brainsim de la École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Suiza).

En diciembre de 2006 un grupo de investigación de la Universidad de Bilkent (Turquía) batía un récord

mundial con la resolución de un modelo electromagnético con 23 millones de incógnitas. Menos de cuatro años después un grupo de las Universidades de Vigo y Extremadura, junto con técnicos del CESGA, resolvían un modelo del mismo tipo con más de 1.000 millones de incógnitas. Estos modelos resultan fundamentales para, por ejemplo, diseñar de modo óptimo la disposición de emisores y receptores de los sistemas de comunicaciones en aeronaves o buques.



©iStockphoto.com/kisimage

La simulación numérica está en nuestras vidas

El uso de técnicas de modelización y simulación numérica en los laboratorios, centros tecnológicos y departamentos de I+D y de diseño de las empresas se traduce en productos y servicios que nos permiten trabajar, disfrutar, movernos, protegernos, anticiparnos, cuidar nuestra salud, alimentarnos y, en definitiva, vivir como lo hacemos actualmente. Algunos ejemplos gráficos ligados a entornos cotidianos permiten visualizar esto de manera muy sencilla.



Investigación en nuevos fármacos obtenidos de medio marino.
Estudio de las comunidades biológicas, las relaciones entre ellas y la productividad del medio.

Avances en predicción meteorológica.



Sistemas de gestión de tráfico aéreo.

Sistemas de mejora de la ventilación y eficiencia energética.

Diseño de edificios con alta carga de ingeniería.

Sistemas de simulación de evacuación y respuesta a catástrofes.

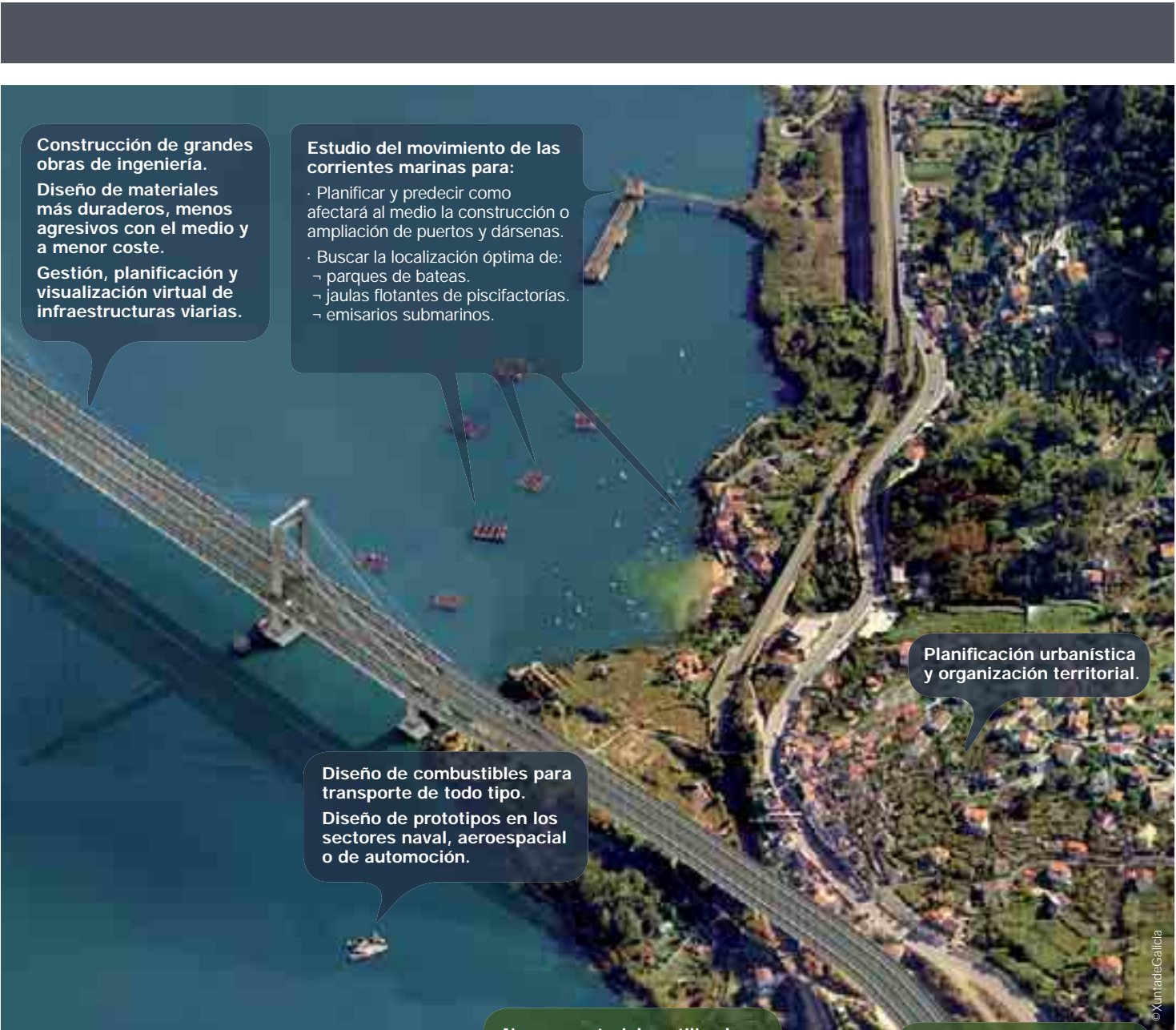
Infraestructuras de comunicaciones que nos permiten mantenernos en contacto con quienes nos importan.



Filtros ópticos utilizados en todo tipo de lentes e instrumentos.

Diseño de materiales empleados en ropa técnica.

©iStockphoto.com/HerrmannRohmleier



Construcción de grandes obras de ingeniería.
Diseño de materiales más duraderos, menos agresivos con el medio y a menor coste.
Gestión, planificación y visualización virtual de infraestructuras viarias.

Estudio del movimiento de las corrientes marinas para:

- Planificar y predecir como afectará al medio la construcción o ampliación de puertos y dársenas.
- Buscar la localización óptima de:
 - parques de bateas.
 - jaulas flotantes de piscifactorías.
 - emisarios submarinos.

Planificación urbanística y organización territorial.

Diseño de combustibles para transporte de todo tipo.
Diseño de prototipos en los sectores naval, aeroespacial o de automoción.

© Xunta de Galicia



Prevención, predicción y gestión de eventos meteorológicos adversos y catástrofes como avalanchas o avenidas.

© iStockphoto.com/Armitphoto



Nuevos materiales utilizados en prótesis y materiales biocompatibles.
Desarrollo de nanomateriales usados en protectores solares y productos de cosmética.

Innovación en productos fitosanitarios utilizados de modo habitual en nuestros parques y jardines.

Diseño de fármacos, vacunas y alimentos funcionales de uso en la infancia.
Caracterización de dianas para fármacos.

© iStockphoto.com/LiseGagne

Más cerca de poder predecir el comportamiento de las fuerzas de la Naturaleza

©iStockphoto.com/Josemaría Toscano

Las fuerzas de la Naturaleza determinan las condiciones de vida de los seres humanos. Los procesos relacionados con ellas son enormemente complejos, pero recrearlos es la única forma de poder anticiparse y reaccionar. Es lo que ocurre con el clima y la meteorología o la actividad sísmica. La simulación numérica permite crear modelos a partir de datos sobre lo que ya ha ocurrido y está ocurriendo para tomar decisiones de cara al futuro.

Desde la planificación urbanística en grandes territorios hasta la ropa que hemos de elegir para mañana son decisiones que las operaciones de cálculo en supercomputadores hacen más fáciles y, sobre todo, fundamentadas simulando procesos y consecuencias.

La predicción meteorológica es una de las tareas científicas vinculadas de forma más estrecha a la simulación numérica. Para predecir el comportamiento futuro de la atmósfera se utilizan los modelos meteorológicos, que, tomando como referencia la situación en un instante determinado, puede pronosticar lo que ocurrirá en un instante posterior. La gran cantidad

de datos que se utilizan como referentes y que son obtenidos de las estaciones meteorológicas y de los satélites (como el Meteosat), de boyas oceánicas, de globos sonda, etc. se procesan en supercomputadores para dar lugar a la simulación de lo que ocurrirá plasmándose, por ejemplo, en los mapas del tiempo que vemos en televisión o en la prensa.

En Galicia, el Servicio Meteorológico de la Xunta (Meteogalicia) ofrece sus pronósticos mediante un sistema que cubre todo el territorio gallego con cuatro kilómetros de resolución, bajando hasta un kilómetro en lugares de difícil orografía, precisión solamente alcanzable gracias a los recursos

Las cenizas del volcán

La erupción de un volcán en la remota Islandia en abril de 2010 se tradujo en un absoluto caos aéreo en todo el mundo durante semanas por el peligro que las nubes de ceniza suponían para los motores de los aviones. Este es un claro ejemplo sobre cómo las fuerzas de la Naturaleza pueden desestabilizar el ritmo al que se mueve todo el Planeta ocasionando pérdidas económicas y otros perjuicios de todo tipo a causa del cierre de los aeropuertos y la cancelación de miles de vuelos. Tras el caos inicial comenzaron los esfuerzos por generar instrumentos de predicción sobre la actividad del volcán para minimizar las consecuencias.

Tan sólo dos meses después de las primeras emisiones del volcán Eyjafjallajökull el Grupo de Modelos y Software para el Medio Ambiente de la Universidad Politécnica de Madrid presentó un modelo informático capaz de predecir la evolución de la nube de cenizas con una proyección de hasta tres días. El sistema, que se puso a disposición en internet para consulta gratuita, combina la información sobre el comportamiento del volcán, obtenida dos veces al día por los satélites, con la información medioambiental que influye sobre la evolución de la nube volcánica, cómo es la fuerza y orientación de los vientos, la humedad del aire, etc. El resultado son imágenes sobre el mapa que representan la evolución de la nube en forma de mancha.



©iStockphoto.com/IanMcDonnell

Cómo se mueven las aguas

La recreación de las corrientes marinas y otros aspectos relativos a la hidrodinámica son tan valiosos para determinar y predecir niveles de productividad pesquera y acuícola como para prever la dispersión de contaminantes a partir de vertidos. El Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE) ha desarrollado desde Barcelona, en colaboración con el Grupo de Gestión Naval e Industrial de la Universidad de A Coruña, un sistema para ayudar a tomar decisiones sobre vertidos marinos que, a partir de la introducción de una serie de datos iniciales, es capaz de predecir hacia

dónde se dirigen los contaminantes o, en caso de ser una mancha compacta, si se va a disgregar. Este tipo de trabajos se remontan ya en Galicia a los años 80 del siglo pasado, cuando el Grupo de Ingeniería Matemática de la Universidad de Santiago de Compostela, por encargo del Gobierno autonómico, simuló los vertidos de aguas residuales en las rías gallegas para determinar el emplazamiento óptimo de emisarios marinos, con el objetivo de proteger las zonas de playa y los cultivos marinos. Los modelos desarrollados fueron utilizados desde Inglaterra hasta Chile.

El estudio de la distribución espacial de poblaciones marinas o de los procesos que afectan a la calidad y motilidad de los nutrientes en el agua son de gran importancia para la planificación de la explotación comercial de las especies. En este contexto se enmarcan proyectos como el liderado por el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) para determinar y predecir la productividad del cultivo marino en función de las lluvias, cuantificando los aportes atmosféricos de nutrientes orgánicos e inorgánicos y valorando su impacto sobre el fitoplancton y las bacterias marinas.



del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA). Las aplicaciones de sus procesos de simulación tienen un gran calado socioeconómico. Meteogalicia proporciona a los medios de comunicación los datos para sus espacios meteorológicos, es la encargada de informar las alertas que emite Protección Civil ante contingencias como los temporales y avisa a las autoridades sanitarias sobre la llegada de olas de calor. Pero también realiza la predicción del viento para parques eólicos y, a partir del pronóstico de precipitaciones, la previsión del desbordamiento de ríos. Además, los modelos numéricos les permiten hacer predicciones de oleaje y de la hidrodinámica del océano (velocidad y dirección de la corriente, nivel del mar, temperatura y salinidad).

Los sistemas de predicción meteorológica avanzan a la par que la capacidad y potencia de los supercomputadores, haciendo posible abordar cuestiones muy complejas que afectan directamente a la precisión de los pronósticos pero que hasta ahora eran misión imposible por la enorme envergadura de las simulaciones. Así, comienzan a abordarse problemas como la evolución a lo largo del día de la altura

de la capa de la atmósfera más próxima a la Tierra, afectada por turbulencias debidas a los cambios de temperatura en las diferentes partes de la jornada y determinante a la hora de realizar modelos meteorológicos más fiables. Científicos de Holanda, el Reino Unido y los Estados Unidos llevaron a cabo recientemente un proyecto sobre este tema para el que necesitaron realizar una simulación masiva que requirió de 32.768 procesadores, la mitad de la capacidad de cálculo de los supercomputadores de la Infraestructura Europea Distribuida para Aplicaciones de Supercomputación (DEISA).

Cambio climático

Proyectos como el anterior son también muy relevantes para los estudios sobre el clima y los cambios que sufrirá en el futuro. Un centenar de científicos consiguieron recrear las consecuencias del cambio climático para Galicia a un siglo vista gracias a la simulación numérica. En función de los cálculos realizados mediante supercomputadores se prevé que la temperatura habrá aumentado 3,5°C a finales de siglo y que para entonces el nivel del mar estará entre 0,5 y 1,4 metros por en-

Del petróleo a la energía de fusión

La simulación numérica es tan importante para la localización de los combustibles fósiles de los que tanto dependemos en la actualidad como para la búsqueda de alternativas viables en el ámbito de las energías limpias. Mientras se avanza en la investigación de las renovables, es necesario hacer frente a una demanda de petróleo que amenaza con alcanzar los 116 millones de barriles al día en 2030, según los cálculos de la Agencia Internacional de la Energía. Para poder extraerlo, primero es necesario localizar e identificar las zonas del subsuelo ricas en hidrocarburos. Dado que el coste medio de una perforación oscila entre los 10 y los 15 millones de euros, es importante apuntar bien y ahí es donde entran las simulaciones numéricas avanzadas, que permiten estimar con mayor certeza la cantidad y ubicación de hidrocarburos. Además, estas simulaciones

se utilizan tanto para mejorar el diseño de las herramientas de prospección como para interpretar correctamente los resultados obtenidos con dichas herramientas.

De cara al futuro, la simulación numérica es un catalizador de la creación y desarrollo de fuentes de energía sostenibles, es decir, medioambiental y económicamente viables. La supercomputación juega un papel crucial en el proceso necesario para que las llamadas energías limpias dejen de ser testimoniales y se conviertan en los actores principales del mix energético. Esto es especialmente visible en el caso de la energía de fusión, la liberada cuando dos núcleos atómicos de carga similar se fusionan para formar un núcleo más pesado. Cuando los dos núcleos tienen una masa superior a la del hierro, el proceso requiere un aporte ingente de energía. Sin embargo,

cuando los núcleos son más ligeros en el proceso de fusión se libera una gran cantidad de energía, que podría ser empleada en la bomba de hidrógeno y en un futuro en la producción de energía eléctrica en un hipotético reactor. Esta fórmula se perfila como alternativa a la utilizada por las centrales nucleares que conocemos, que generan energía a partir de procesos de fisión, ya que su impacto ambiental será considerablemente menor. Ahora falta por solucionar el problema de la enorme cantidad de calor que hay que aplicar para lograr la fusión, que asciende a más de cien millones de grados centígrados, pero también está pendiente lograr el control del estado de la materia que se crea como consecuencia: el plasma, en el que se da un absoluto desorden de iones y electrones.

Todos los miembros de la Unión Europea colaboran juntos en este reto al

cima del actual con un calentamiento del agua de más de 1°C. Las consecuencias también han sido calculadas y permiten anticiparse en la toma de decisiones. Por ejemplo, uno de los efectos será la pérdida del 60% de la materia orgánica de los suelos gallegos, lo que demandará un uso intensivo de abonos y enmiendas orgánicos. Otra de las medidas recomendadas es el refuerzo del dispositivo antiincendios, dado que las altas temperaturas y el aumento de las épocas de sequía serán caldo de cultivo para el fuego. Además, las administraciones deberán prever el efecto socioeconómico que tendrá la proliferación de especies animales subtropicales en el mar en detrimento de las más boreales, como la sardina, y el empeoramiento de la calidad del marisco, todo ello como

consecuencia del calentamiento de las aguas. Este complejo escenario de futuro no podría haber sido proyectado en detalle y de forma tan precisa sin la modelización numérica, así como tampoco la oportunidad de tomar medidas preventivas y planificar a largo plazo.

En esta misma línea se inscriben investigaciones muy específicas pero de gran calado como la que lleva a cabo el gallego Juan Antonio Añel, citado por la revista Science como promesa científica, desde el Grupo de Investigación de Física de la Atmósfera de la Universidad de Vigo. El principal objeto de estudio de Añel es el posible efecto del cambio climático sobre la tropopausa, una capa de la atmósfera situada a 13.000 metros de altura sobre la Tierra. Se sabe que la tropopausa está

más alta en las zonas tropicales y, por el contrario, mucho más baja en los polos y lo que se está observando ahora es que la estructura que presenta en esas zonas tropicales se está extendiendo, es decir, que cada vez es más alta en una mayor superficie en el Planeta. Esto convierte la tropopausa en un indicador de la extensión del clima tropical, un fenómeno que tiene consecuencias directas sobre la agricultura, el consumo energético e incluso sobre la navegación aérea. Esta última aprovecha un fenómeno asociado a esta capa de la atmósfera: la corriente en chorro, que consiste en un flujo de aire que se encuentra donde termina la tropopausa tropical y que se usa para ahorrar combustible, tratando siempre de aprovechar su empuje. Si hay cambios en la



amparo de la Comunidad Europea de Energía Atómica (Euratom), promotora de un proyecto de investigación para controlar el plasma de fusión y conferirle estabilidad, una tarea en la que se han consumido más de diez millones de horas de computación en dos años. Las fuentes renovables ya en explotación pero aún en proceso de optimización se están beneficiando también de la simulación numérica en su camino hacia la rentabilidad y la eficiencia. El centro tecnológico de la metalurgia gallego, Aimen, colabora con el Centre Scientifique et Technique du Bâtiment en un proyecto europeo de calefacción termosolar sostenible en el que la computación se está utilizando para simular el comportamiento hidrodinámico en el tanque de almacenamiento de alta temperatura que asegurará la autonomía y estabilidad del abastecimiento en el sistema.

©iStockphotocom/ChristianI-agreek

Prevenir catástrofes

Algo similar a las predicciones meteorológicas y climáticas ocurre con la gestión del territorio y la planificación urbanística. Dibujar mapas sobre la orografía costera prevista como consecuencia del aumento del nivel del mar y la erosión es posible gracias a la simulación numérica. Dónde no construir y qué hacer con las construcciones ya existentes que se verán afectadas por ese fenómeno son decisiones que ahora se pueden reflexionar antes de que se produzcan desgracias materiales y personales.

En esta línea se encuentra toda la investigación desarrollada para poder anticiparse a los movimientos sísmicos, una tarea directamente dependiente de la simulación computacional. Mediante la recogida y procesamiento de la ingente



información que se deriva de las ondas sísmicas se puede prever el comportamiento de los puntos de origen de terremotos. Es lo que hicieron los investigadores del proyecto EuQuake, que utilizaron los recursos de la infraestructura europea de supercomputación DEISA para avanzar en la configuración del mapa europeo de riesgos sísmicos. También es una de las líneas de trabajo del Earth Simulator (Simulador de la Tierra), un superordenador japonés en funcionamiento desde finales de 2001 con fines científicos.

La modelización numérica puede, en este mismo sentido, ayudar a gestionar mejor los recursos públicos optimizando la toma de decisiones sobre el abordaje de grandes infraestructuras y obras civiles. Un ejemplo es el trabajo que realizó el Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería de la Universidad de A Coruña para determinar si era preciso dragar la desembocadura del río Ulla, en la Ría de Arousa (Pontevedra). Tras simular varios escenarios y analizar cómo se vería afectada la circulación de agua en la ría en función de distintos parámetros de mareas, vientos y corrientes concluyeron que el dragado empeoraría la situación actual, en la que la producción de marisco se ve afectada negativamente por la mezcla de agua dulce y salada. Eso llevó a las autoridades a desechar la actuación.

©iStockphotocom/MikeBentley

tropopausa la corriente se ve afectada y, en consecuencia, la navegación aérea también. Anticiparse a estos procesos mediante su simulación computacional es importante para buscar alternativas y soluciones.

Fuentes:

Revista Dixitos. Diciembre 2009 (Págs. 5 y 10) y febrero 2010 (Págs. 10-11).
 DEISA Digest 2010 (Págs. 4-6, 7-9 y 32-34).
 La Opinión de A Coruña. 5/7/2009 (Págs. 28-29).
 La Voz de Galicia. Suplemento Innova Galicia. 17/5/2009 (Pág. 6). 14/12/2008 (Pág. 6). 19/4/2009 (Pág. 1).
 El Progreso de Lugo. Suplemento Empleo&Mercados. 5/9/2009 (Pág. 11).
 La Región. 20/5/2010 (Pág. 40).
 Público. 7/7/2009.
 www.tendencias21.net.
 Artículo 'Que las matemáticas se hagan visibles', de Alfredo Bermúdez de Castro, publicado en El País el 18/5/2010.



Más allá de la tierra

La supercomputación permite realizar simulaciones sobre escenarios que, a pesar de estar muy lejos de nuestro alcance directo, influyen directamente sobre nosotros. Es el caso del Sol, cuyas manchas tienen impacto directo sobre el clima en la Tierra e incluso sobre los satélites a causa de su actividad electromagnética. El Centro Nacional de Investigación Atmosférica de los Estados Unidos logró formular, con la colaboración del Instituto Max Planck para la Investigación del Sistema Solar (Alemania), el primer modelo del comportamiento de estas manchas.

©iStockphotocom/ChristianMiller

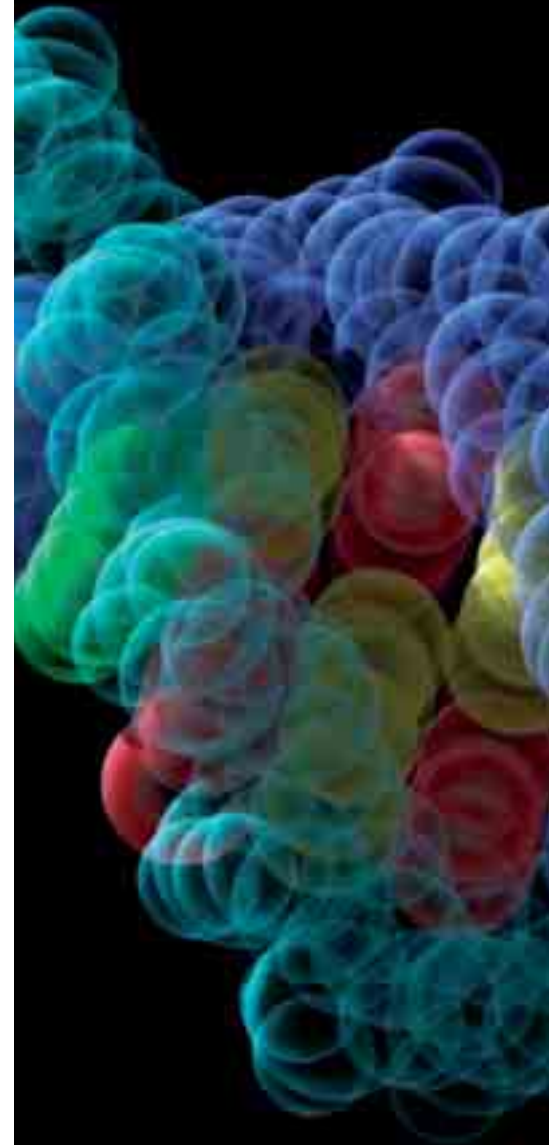


En el camino hacia la replicación de la vida

La simulación numérica es una ventana abierta a la recreación de la vida, desde la escala molecular en el cuerpo humano hasta la que permite reconstruir el árbol de la vida, es decir, la historia de la vida en la Tierra. La posibilidad de replicar vida en los ordenadores gracias al cálculo computacional es para los científicos la vía para avanzar en la lucha contra el cáncer, la prevención de infartos y el desarrollo de implantes óseos, entre muchas otras cuestiones de primer orden para la salud humana. Los biomateriales, el procesamiento de imágenes médicas, las nanopartículas magnéticas, la cirugía robotizada, la neurotecnología y la nanotecnología forman parte del abanico de avances que inciden directamente sobre la salud humana y el aumento de las expectativas de vida y ninguna de ellas sería posible sin la supercomputación.

Una de las grandes ventajas de la observación de un organismo virtualizado frente a uno real es la posibilidad de manipular el tiempo. Una vez que se consigue generar la simulación de un organismo se puede, por ejemplo, recrear el efecto que tendría sobre él

la infección provocada por un virus y ver muy rápidamente las consecuencias para el organismo acelerando en el ordenador lo que sería el proceso en tiempo real. Por otra parte, la simulación numérica disminuye la dependencia de la experimentación animal, sustituyen-



El origen de la vida

La simulación numérica permite el estudio del origen de la vida desde la recreación de los procesos enzimáticos que hacen posible que un organismo funcione hasta la reconstrucción del llamado árbol de la vida, es decir, la historia de la vida en la Tierra. Las primeras simulaciones complejas de las enzimas, las moléculas de las

células que mediante reacciones químicas denominadas catálisis hacen posible la vida, no han sido posibles hasta hace muy poco por la enorme cantidad de recursos de cálculo computacional que demandaban. Aunque aún queda mucho trabajo por hacer en este campo, científicos ingleses y polacos consiguieron recientemente, gracias a los recursos de DEISA (Infraestructura Europea Distribuida para Aplicaciones de Supercomputación), llegar a un nivel de detalle muy significativo, que abre nuevas posibilidades al diseño de

fármacos y biomateriales. En este mismo campo se desarrolla el trabajo científico del grupo de Investigación en Evolución Molecular y Bioinformática de la Universidad de Vigo, que, en el marco del Programa Ideas del Consejo Europeo de Investigación, estudia genomas enteros y sus mecanismos de cambio para recrear la historia de la vida en el Planeta. Esto facilitará la comprensión del proceso de desarrollo de los genes y la adaptación de los organismos a sus respectivos medios.

do cada vez en mayor medida el uso de cobayas por la recreación de sistemas biológicos complejos, por ejemplo en la búsqueda de las proteínas que podrían ser las dianas más interesantes para nuevos fármacos. Además, el cálculo computacional permite hacer visibles al ojo humano sistemas que a su tamaño real no lo son, como ocurre con las nanopartículas, en pleno desarrollo como vehículos para medicinas.

Lucha virtual y real contra el cáncer

La quimioterapia actual, a pesar de haber avanzado enormemente en los últimos años, sigue conllevando, por un lado, un elevado índice de incertidumbre en su eficacia sobre cada tumor y en cada paciente y, por otro, fuertes efectos colaterales para los órganos sanos. La búsqueda de terapias diana mediante el cribado molecular y las nuevas técnicas de farmacogenómica y farmacogenética, ambas dependientes del cálculo computacional, son una gran esperanza en la lucha contra el cáncer.

El diseño de fármacos 'inteligentes' pasa por una enorme cantidad de cálculos destinados a simular los procesos bioquímicos y moleculares que intervienen en la recepción y absorción de los principios activos (las sustancias con capacidad terapéutica) y hacer millones de ensayos virtuales para seleccionar los más efectivos antes de realizar las costosas pruebas experimentales en el laboratorio, a los que siguen los ensayos clínicos en pacientes.

Conocer el proceso de unión o docking entre proteínas humanas (el centro en el que debe actuar el fármaco) y pequeñas moléculas (los principios activos o ligandos) es una tarea clave para el desarrollo de fármacos que mejoren el tratamiento de enfermedades como el cáncer. Se trata de una labor compleja porque los ligandos disponibles hoy día forman una auténtica quimioteca de varios millones de moléculas. Probar todos ellos con una proteína en el laboratorio resultaría inviable en términos de tiempo y recursos, por eso se hace necesario recurrir a un cribado virtual. Esto es lo que hacen los científicos del Centro de Biología Molecular Severo Ochoa (CSIC-UAM), que simulan el docking de determinadas proteínas con millones de ligandos para determinar cuáles de ellos resultan más prometedores para ser analizados ex-





El atasco más mortífero

Las enfermedades cardiovasculares son la primera causa de mortalidad en el mundo. En los últimos años se han llevado a cabo importantes esfuerzos para desarrollar modelos matemáticos que puedan simular el comportamiento del sistema cardiovascular para mejorar el diagnóstico temprano y optimizar el diseño de las operaciones quirúrgicas.

La investigación cooperativa entre científicos de Finlandia, Holanda y Canadá con soporte en recursos de supercomputación ha permitido el desarrollo del proyecto LIPOS, destinado a reproducir el proceso mediante el cual el 'colesterol malo' (lipoproteínas de baja densidad o LDL) se va depositando en las arterias hasta formar placas que dificultan la

circulación de la sangre o incluso la interrumpen totalmente, provocando así ataques al corazón, ictus cerebrales o trombosis. Los científicos confían en poder desarrollar tratamientos a partir del conocimiento detallado de cómo interactúan las partículas de LDL con ciertas enzimas, agentes oxidantes o azúcares responsables de la formación de placas.



perimentalmente en el tratamiento del cáncer. Un solo docking tarda cerca de cinco minutos, por lo que procesar todos los ligandos de la quimioteca que están cribando con un único equipo llevaría 40 años, así que ellos utilizan recursos de computación distribuida a través de plataformas voluntarias en las que particulares ponen a disposición de la comunidad científica la capacidad de cálculo de sus equipos informáticos cuando no los están usando.

El resultado será no sólo una actividad del fármaco más eficaz sino también más certera, evitando interferencias con otros destinos no deseados, lo que daría lugar a los conocidos como 'efectos secundarios'.

Esto es lo que se llama diseño de 'terapias diana' y, gracias a la supercomputación, está encontrando aliados en la ciencia de lo más pequeño: la nanotecnología. Diseñar sistemas complejos del tamaño de entre un virus y una bacteria y conseguir que funcionen como portado-

res de fármacos era ciencia ficción hasta hace poco, pero científicos como los del grupo Nanobiofar de la Universidad de Santiago de Compostela (USC) están desarrollando sistemas con aplicaciones farmacológicas de entre 100 y 200 nanómetros (siendo un nanómetro la millonésima parte de un milímetro). La misión de estos nanosistemas es transportar antitumorales directamente a las células cancerígenas con una elevada permanencia en sangre, lo que aumenta el poder de cada dosis reduciendo así la necesidad de dosis elevadas, y con la capacidad de dirigirse muy directamente al tumor, disminuyendo así los efectos secundarios. Su diseño y la simulación de su funcionamiento es solamente posible gracias a la modelización numérica.

Perfiles genéticos para terapias personalizadas

La identificación de dianas terapéuticas alcanza su mayor grado de sofisticación en

El oro en su versión más preciosa

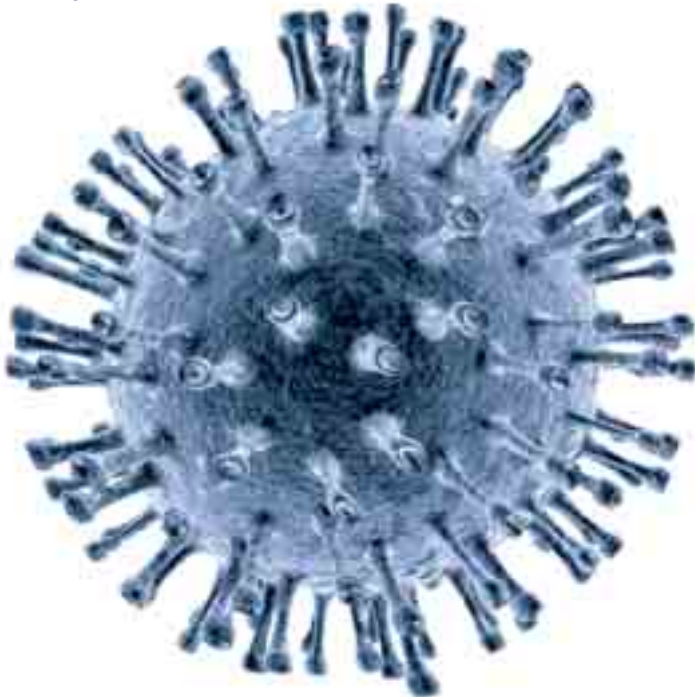
Las técnicas de simulación numérica están haciendo posible que materiales preciosos como el oro desplieguen todas sus propiedades más allá de su valor estético. El Grupo de Química Coloidal de la Universidad de Vigo está logrando importantes avances en la fabricación, caracterización y modelización de nanopartículas de oro y plata que, aplicadas a una muestra de sangre, orina o saliva o introducidas en el cuerpo humano, permitirían detectar alergias, consumo de drogas o tumores. Esto es posible gracias a que estos dos metales adoptan diferentes colores cuando se reduce su tamaño y generan un campo eléctrico en su superficie que permite hacer detecciones muy precisas. Colocando biosensores específicos en las nanopartículas se hace posible la detección y las propiedades de color del oro y la plata permiten la localización visible al ojo humano gracias a potentes microscopios. La visualización de estas nanopartículas es posible gracias a que el microscopio en sí mismo es un gran simulador, reproduciendo la imagen a escala suficiente para que el ojo la reconozca.

La investigación cooperativa entre científicos de varios países europeos bajo la coordinación de un grupo finlandés ha permitido incluso ir más allá, planteando la posibilidad de que las nanopartículas de oro destruyan el cáncer gracias a su capacidad para calentarse mediante láser infrarrojo hasta el punto de matar las células tumorales próximas a ellas. Para realizar las primeras simulaciones de este proceso han utilizado importantes recursos de supercomputación.

Hacer que los virus curen

El grupo de Biología Estructural del CSIC hace simulaciones en el CESGA para generar imágenes en 3D de adenovirus, una clase de virus que provocan enfermedades respiratorias como bronquitis o neumonía y otras como gastroenteritis, conjuntivitis y cistitis. Para generar mapas tridimensionales

con buena resolución utilizan decenas de miles de imágenes combinadas. Su objetivo es la observación detallada de los adenovirus para desarrollar antivirales más eficaces pero también para diseñar vectores terapéuticos, utilizándolos como portadores de genes, vacunas o antitumorales.



©iStockphoto.com/HenrikJonsson

el trabajo de los expertos en relacionar la relación de los genes con las enfermedades. El grupo de Medicina Genómica de la USC dirige gran parte de sus esfuerzos a identificar y analizar los genes que tienen que ver con enfermedades complejas para, mediante la farmacogenómica y la farmacogenética, poder diseñar tratamientos eficaces y menos agresivos para los pacientes en función de su ADN, simulando y comparando su respuesta ante determinados fármacos gracias en parte a los recursos del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA). Es lo que se llama medicina a la carta y, aunque aún estamos lejos de la personalización genética de las terapias, ya se está trabajando en tratamientos que puedan responder mejor en determinados perfiles, es decir, en grupos de individuos que presentan características genéticas similares. En cualquier caso, está previsto que el uso de secuenciadores ultrarrápidos de ADN, gracias a los que se obtiene la secuencia completa del genoma

de una persona en unas pocas horas, facilite la expansión del diagnóstico basado en el perfil genético del paciente.

El equipo de investigadores dirigido por Ángel Carracedo también es reconocido a nivel internacional por sus trabajos en oncogenética y neurogenética, basados en la identificación de los genes que determinan la propensión a padecer cánceres y enfermedades neuronales, muy habitualmente heredados, con el objetivo de poder diagnosticarlos antes de que se manifiesten. En este proceso también se utilizan técnicas de simulación numérica, algo comprensible si se tiene en cuenta que los ensayos virtuales han de realizarse sobre los 25.000 genes que componen el genoma humano.

La evolución de los modelos computacionales y la potencia de los supercomputadores están permitiendo también el análisis de procesos tan específicos como el de separación de la doble hélice del ADN, esencial en procesos de divi-

Del hueso al avión

El cristal bioactivo está considerado actualmente como el material más biocompatible en el campo de la regeneración ósea debido a su capacidad para inducir la formación de hueso. Al ser una pasta, permite rellenar aquellas zonas con falta de hueso o zonas osteoporóticas y actúa provocando la regeneración del tejido óseo dañado. La bioactividad de estos materiales es simulada mediante recursos computacionales para observar su eficacia antes de darle uso como implantes óseos o dentales.

A pesar de que su uso es generalizado desde hace cuarenta años, hasta hace poco no ha sido posible observar a nivel molecular la interacción de los cristales bioactivos con el tejido vivo para optimizar su eficacia regenerativa, pero también para encontrar usos de estos materiales en la fabricación de

componentes ligeros con gran capacidad de carga para industrias como la aeronáutica y la automovilística. El avance de los recursos de simulación computacional ha dado soporte a estas investigaciones.



©iStockphoto.com/SebastianKaulitzki

sión y reparación celular. En el Centro de Supercomputación de Barcelona se ha llegado a simular el proceso de separación de 12 de los 3.000 millones de pares de bases que componen el genoma humano, dando lugar a 10 millones de fotos estructurales que forman la película de cómo se despliega. Esto da una idea de todo lo que queda por hacer, pero también es un gran paso en sí mismo para encontrar nuevas dianas farmacológicas.

Fuentes:

La Razón digital (www.larazon.es). 28/7/2009.
 Notiweb (www.madrimasd.org). 24/6/2008.
 La Voz de Galicia. Suplemento Mercados. 27/9/2008 (Pág. 6). 11/10/2010 (Pág. 6).
 El País Digital (www.elpais.es). 2/6/2010.
 El País. 20/5/2010 y 21/5/2010.
 DEISA Digest 2010. (Págs. 14-15, 25-27, 42-44 y 48).
 El Correo Gallego. 9/11/2008 (Pág. 18).
 Revista Dixitos. Febrero 2009 (Pág. 4) y diciembre 2009 (Pág. 4).
 Xornal de Galicia. 22/3/2009 (Pág. 30-31).
 Faro de Vigo. 4/6/2010 (Pág. 6).
 Cordis. Servicio de Información en I+D Comunitario. 17/8/2008.

La aplicación a la industria: menos tiempo y costes y más precisión

La ingeniería y el diseño industrial han experimentado una auténtica revolución en las últimas décadas gracias a la simulación numérica, cuyos avances han permitido la puesta en marcha de lo que comúnmente se denominan 'laboratorios virtuales'. En esencia, se trata de un conjunto de herramientas computacionales que permiten reproducir el diseño de los productos y probar su funcionamiento antes de proceder a la costosa fabricación de prototipos físicos, sobre los que ahora es posible realizar las pruebas experimentales con mayor eficiencia y en menos tiempo gracias al trabajo previo realizado sobre los prototipos virtuales.

Cambiar una pieza en un prototipo virtual se hace de un día para otro, mientras que en uno físico supone semanas o meses. Además, los modelos virtuales permiten comprender mejor cómo trabajan físicamente los productos porque aportan más información, lo que ayuda a tomar decisiones para desarrollar productos más fiables, ligeros y económicos, per-

mitiendo incluso soluciones más sencillas y eficientes para su fabricación.

Una industria en la que el uso de la simulación numérica forma parte de las rutinas de trabajo es la de la automoción. La utilidad de sus resultados sobre todo el proceso de fabricación, desde los estudios iniciales de una pieza hasta el desarrollo de los medios productivos, pasando por el diseño y los

1.000 millones de incógnitas

El supercomputador Finis Terrae del CESGA hizo posible el récord mundial de resolución de incógnitas en 2010 con base en un trabajo de simulación numérica realizado por un grupo de investigadores de las Universidades de Vigo y Extremadura.

El grupo HEMCUVE++ resolvió 1.000 millones de incógnitas, una hazaña computacional que duplicó los resultados que en 2009 le habían hecho merecedor de los premios internacionales Itanium Innovation Award y PRACE Award. Los problemas resueltos durante este reto computacional pertenecían al ámbito de la electromagnética, pero sus aplicaciones pueden ser de interés para la mejora del diseño industrial en ámbitos como la automoción, la industria aeroespacial o el naval. Así, su trabajo puede ayudar a buscar la manera más eficiente de simular el comportamiento electromagnético de barcos, automóviles y aviones en la etapa del diseño para poder verificar y garantizar el cumplimiento de los requisitos impuestos, minimizando así los problemas posteriores al proceso de fabricación. Esto evitará, por ejemplo, interferencias entre las antenas y radares en un barco o un nivel de radiaciones en cubierta dañino para los tripulantes.



Por mar y aire

La Unión Europea ha fijado a los fabricantes de aviones cinco objetivos que deben ser alcanzados antes de 2020: reducir un 20% los accidentes, desarrollar un sistema de tráfico aéreo que gestione 16 millones de vuelos al año, reducir la mitad de la contaminación acústica de los aviones, reducir a la mitad las emisiones de dióxido de carbono y bajar un 80% las emisiones de óxido de nitrógeno. En el abordaje de todos estos retos están interviniendo modelos de simulación numérica, imprescindibles para realizar todas las pruebas de las innovaciones que se generen en el proceso.

En este contexto, investigadores del Departamento de Mecánica de Fluidos de la Universidad Politécnica de Madrid estudian el fenómeno de la turbulencia de flujos para mejorar el rendimiento de las turbinas de las aeronaves, realizando modelizaciones con los recursos del Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid. La información obtenida de estas simulaciones permite optimizar el uso de las turbinas rebajando el coste de cada vuelo a través de la reducción del uso del combustible, lo que también baja las emisiones de gases contaminantes.

Las herramientas de simulación fluido-dinámica son también muy útiles en el diseño de barcos. La empresa gallega

Vicus DT, especializada en el sector naval, las utiliza para encontrar las combinaciones de mayor eficiencia energética reproduciendo la interacción de todos los elementos que componen el barco (casco, hélices y timón).

Al igual que ocurre con los coches de Fórmula 1, la competición náutica también encuentra en la simulación muchas armas de trabajo para diseñar y probar embarcaciones del más alto rendimiento. El departamento de Computación Científica y del Modelaje del Instituto Politécnico de Milán es colaborador habitual de los fabricantes de barcos para la Copa América, simulando los flujos aerodinámicos e hidrodinámicos sobre casco, mástiles y velas para optimizar su diseño.

ensayos, la han convertido en una exigencia. Los proveedores de componentes o piezas de las grandes empresas de fabricación de automóviles tienen la obligación de presentar sus simulaciones cuando optan a un contrato. No hacerlo les aparta de la carrera frente a sus competidores.

El sector de la automoción facturó en Galicia alrededor de 9.000 millones de euros en 2009. Su industria auxiliar es muy potente y su competitividad se debe en parte a los servicios que le presta el Centro Tecnológico de Automoción de Galicia (CTAG), que dispone de un sistema de computación propio pero que recurre al Centro de Supercomputación de Galicia

(CESGA) cuando las simulaciones requieren una gran capacidad de cálculo.

Además de los servicios que presta a empresas, el CTAG lleva a cabo proyectos de I+D en los que la simulación es un elemento central. Estos proyectos están enfocados tanto al producto- buscando mejores niveles de seguridad, confort y comunicación para las próximas generaciones de vehículos-, como al proceso y los materiales -diseño de tecnologías y herramientas de simulación de procesos productivos y puestos de trabajo y desarrollo de nuevos materiales plásticos y de sus procesos de transformación para su aplicación en el sector de automoción-.





©/iStockphoto.com/MaciejNoskowski

Materiales y procesos

Industrias pesadas como la metalúrgica tienen en la simulación numérica un aliado fundamental para lograr innovaciones de producto y de proceso que suponen una ventaja competitiva decisiva. Es el caso de la empresa gallega Ferroatlántica, que con la ayuda del Grupo de Ingeniería Matemática de la Universidad de Santiago desarrolló un nuevo electrodo para los hornos de los que se obtiene el silicio metálico que actualmente es líder en el mercado por reducir los costes de producción en más de un 10%. El programa de simulación desarrollado permitió mejorar el diseño y operación de este electrodo, lo que impuso su uso generalizado sobre los tradicionales. Otro modelo de simulación

permitió a esta empresa desarrollar un método de colada del silicio que mejora la homogeneidad de su grado de pureza. En la ciencia e ingeniería de materiales son fundamentales las pruebas que determinan su resistencia, flexibilidad, aislamiento o cualesquiera que sean las propiedades que se buscan en ellos. Los ensayos de fatiga son imprescindibles, por ejemplo, en metales, plásticos o cerámicas. La simulación numérica permite aplicar multitud de variables de presión, temperatura, etc. y reproduce muy rápido procesos de repetición, por ejemplo, la apertura de una manilla miles de veces, que en un ensayo mecánico son costosos en tiempo y dinero.



©/iStockphoto.com/OlegFedorenko

El paso anterior a los dummies

Un área específicamente destacada en el diseño de vehículos es la de la seguridad. En el CTAG se llevan a cabo numerosos ensayos virtuales de accidentología para conseguir la validación de los diseños tanto desde el punto de vista del cumplimiento de las especificaciones técnicas y legales como del de la factibilidad de su fabricación. Esto se aplica al diseño e integración en el vehículo de sistemas de retención (cinturones de seguridad, sistemas de retención infantil, etc.) y a ensayos de absorción de energía y análisis del comportamiento anti-impacto de ma-

teriales y componentes. Estos ensayos de simulación permiten que las pruebas posteriores en el laboratorio de impactos, en los que se utilizan prototipos y los muñecos que imitan la fisiología del cuerpo humano (dummies) se hagan mucho más rápido y con menores costes, gracias a la información aportada por las pruebas virtuales.

Las simulaciones de choque frontal con predicción de la ruptura del chasis o de la influencia de los flujos gaseosos en el hinchado de los airbags son algunas de las pruebas virtuales que reducen la necesidad de estrellar caros prototipos en los bancos de ensayo de los centros tec-

nológicos o los centros de diseño de las empresas del sector.

La Fórmula 1 de la simulación

Los modelos numéricos alcanzan un grado de sofisticación muy elevado en los vehículos de alta competición. Los especialistas aseguran que para mejorar el rendimiento de un coche en un segundo se invierten en torno a 15 millones de euros al año. Si no fuese por la simulación numérica, sería todavía mucho más costoso. Los ensayos virtuales permiten realizar mejoras en la aerodinámica que se traducen en una mejor penetración del vehículo en el aire y que se pegue lo más posible

al suelo. Lo mismo ocurre con el motor y la electrónica, que gracias a la telemetría permite a los técnicos detectar problemas en el motor en carrera antes de que se produzcan y actuar sobre él a distancia. Y los materiales en los que se fabrican tanto los monoplaques como los monos y los cascos de los pilotos son sometidos a pruebas virtuales para comprobar su resistencia, por ejemplo, al fuego.

Vehículos sostenibles

La simulación juega también un papel importante en la carrera de la automoción por fabricar vehículos cada vez más respetuosos con el medio ambiente. Un ejemplo de esto es el proyecto estatal de I+D desarrollado por organismos de investigación y empresas españoles para fabricar un autobús ecológico. La empresa gallega Castrosúa y el grupo de Ingeniería Matemática de la Universidad de Santiago de Compostela participan en el diseño de un autobús cuyas emisiones de gases a la atmósfera queden reducidas al mínimo, así como las de ruido, pero no sólo hacia el exterior sino también hacia el interior, mejorando así el confort acústico de los pasajeros. Además, ha de estar especialmente dotado para su circulación en centros históricos, para lo que se están buscando soluciones de maniobrabilidad óptimas. A los socios gallegos del consorcio les corresponde específicamente el cálculo de los ruidos producidos por el motor, la rodadura y la aerodinámica y la modelización de su interacción con diferentes materiales de aislamiento y modelos de amortiguación para buscar la mejor combinación posible antes de pasar a las pruebas mecánicas sobre prototipos reales.

Fuentes:

Revista Dixitos. Febrero 2010 (Pág. 4), febrero 2009 (Pág. 6), julio 2009 (Pág. 3 y 7) y diciembre 2009 (Pág. 2).
 CienciaPopular.com (www.cienciapopular.com).
 La Voz de Galicia. Suplemento Mercados. 19/10/2008 (Pág. 5). 28/12/2008 (Pág. 6). 28/6/2009 (Pág. 6).
 La Razón. 25/1/2010 y 31/5/2010.
 La Razón digital (www.larazon.es). 17/5/2010.
 El Correo Gallego. 16/5/2010 (Pág. 6-7).
 La Voz de Galicia. 28/12/2008 (Pág. 6).
 Artículo 'Que las matemáticas se hagan visibles', de Alfredo Bermúdez de Castro, publicado en El País el 18/5/2010.
 'Investigación en matemática aplicada'. Charla de Alfredo Bermúdez de Castro en el ciclo 'Unha andaina pola Matemática'.
 Notiweb (www.madrimasd.org). 9/7/2007, 27/10/2008 y 20/4/2009.
 El Periódico de Aragón. 15/5/2008.
www.ctag.com.

Visitar un edificio antes de construirlo

La construcción virtual es una técnica que arquitectos e ingenieros están comenzando a utilizar de manera generalizada. El volcado de planos a 3D para que el propietario de una vivienda unifamiliar pueda hacerse una idea de los volúmenes de su casa antes de construirla es algo ya habitual en los despachos de arquitectura y no es más que una simulación computacional realizada en un ordenador personal.

El avance de la tecnología está permitiendo a grandes constructoras saltar de las tres a las cinco dimensiones (5D), un recurso que demanda mucha mayor capacidad de cálculo pero que permite no sólo adentrarse en la edificación antes de que se haya puesto una sola viga, sino también hacer recálculos inmediatos de tiempo y costes sobre toda la estructura cada vez que se modifica virtualmente un sólo elemento o parámetro. Mediante el volcado de la imagen en una sala de realidad virtual se puede atravesar puertas, valorar espacios e incluso probar colores, con la posibilidad de realizar cambios que el modelo redibuja rápidamente.

Esto ya permite actualmente adelantarse a los fallos constructivos, pero, con el tiempo, hará posible incluso recrear situaciones de emergencia como incendios, lo que permitirá mejorar los planes de evacuación.

También en este ámbito, el grupo de Ingeniería Acústica de la Universidad de Vigo ha desarrollado la herramienta oficial de cálculo de propagación de sonido entre estancias del Código Técnico de Edificación, que permite estimar mediante simulación las condiciones de aislamiento acústico de un inmueble y hacer las correcciones necesarias en el diseño para que este cumpla la normativa.



Del Big Bang a la radioterapia

El 10 de septiembre de 2008 comenzó a funcionar en Suiza el Gran Colisionador de Hadrones (LHC) de la Organización Europea para la Investigación Nuclear (CERN), el mayor y más complejo instrumento científico construido por humanos. Después de un parón por avería de más de un año, este acelerador de partículas, puesto en marcha tras más de veinte años de trabajo por parte de miles de científicos, continúa su viaje hacia el origen de nuestro Universo, con la misión de simular los instantes posteriores a la gran explosión que dio lugar a él (el Big-Bang). El LHC es un gran simu-

lador de 27 kilómetros de longitud en el que se provocan choques frontales de protones para generar partículas elementales de la materia y también de la materia oscura o anti-materia, que se cree que constituye la masa de la mayor parte del Universo. Uno de los grandes retos es encontrar el bosón de Higgs, supuestamente responsable de generar las masas de todas las partículas. Si en su

simulación del 'instante original' el LHC descubre que no existe, la teoría física elemental deberá ser reformulada. En este gran experimento participan grupos de investigación de todo el mundo, como el de Altas Energías de la Universidad de Santiago, que gracias a sus ordenadores y, sobre todo, al supercomputador del CESGA, procesan toda la información que les llega desde Ginebra y pueden realizar las simulaciones relacionadas con las diferencias entre la materia y la antimateria, de las que se sabe que no se comportan igual pero no se sabe por qué. Los aparatos de radioterapia que se utilizan en los hospitales para tratar el cáncer emitiendo radiaciones sobre los tumores

son también aceleradores de partículas, aunque de mucha menos energía que el LHC. Mediante simulaciones en las que se hacen pruebas tomando como referencia las características físicas del paciente y del tumor, se calcula cómo aplicar las dosis prescritas. Los grandes inconvenientes de la radioterapia, referentes sobre todo a la afectación de órganos y tejidos sanos adyacentes al tumor, están siendo solventados precisamente por tecnologías relacionadas con las utilizadas en el LHC. La hadroterapia permite controlar de forma mucho más precisa la zona exacta en la que se irradia, actuando de forma más efectiva y evitando las zonas sanas.

Diagnósticos menos agresivos

Las técnicas de simulación numérica son un gran apoyo para el tratamiento de enfermedades graves como el cáncer, pero también pueden proporcionar el método para realizar diagnósticos como alternativa a medios invasivos que pueden acarrear consecuencias negativas para la salud del paciente.

Investigadores de la Universidad Carlos III de Madrid están trabajando en una técnica de reconstrucción de imágenes basada en el uso de microondas para detectar pequeños tumores en la mama. Este método se basa en que los tumores presentan unas propiedades dieléctricas muy diferentes a las de los tejidos sanos cuando inciden sobre ellos las microondas. Basándose en esto, los científicos han desarrollado un algoritmo capaz de traducir la información que se despren-

de de este proceso en una imagen final con la que realizar el diagnóstico. Esta simulación no tiene tanta resolución como la imagen que se obtiene gracias a los rayos X, pero en cambio permite saber con mayor fiabilidad si hay o no tumores y caracterizar su grado de malignidad, reduciendo el margen de error de las técnicas de diagnóstico actuales y la agresividad sobre los tejidos gracias a la menor intensidad y energía de este tipo de radiación no ionizante.

LA SUPERCOMPUTACIÓN EN EL MUNDO

Estructuras supraestatales

PRACE

Partnership for Advanced Computing in Europe (Consortio para la Computación Avanzada en Europa). Proyecto que tiene como objetivo crear un servicio paneuropeo de supercomputación al servicio de la comunidad científica de la UE. El objetivo de PRACE para el año 2010 era instalar sistemas petaflop/s, es decir, con capacidad para realizar mil billones de operaciones por segundo. A nivel jurídico, sus promotores se han propuesto constituir la infraestructura de investigación como una única entidad legal, según explicó el representante del consorcio.

EGI

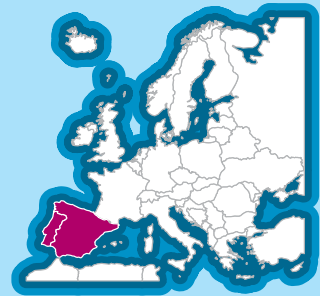
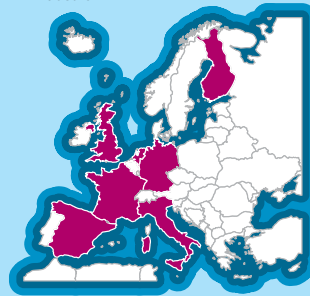
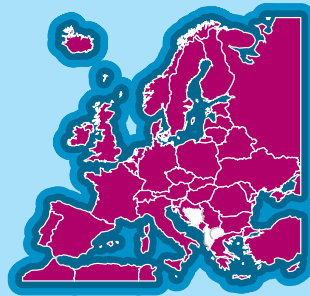
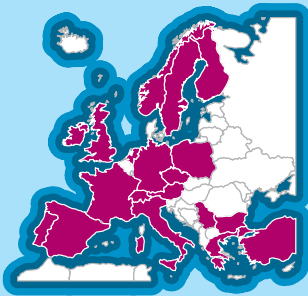
European Grid Initiative (Iniciativa Grid Europea). Se trata de una red de iniciativas Grid estatales que conecta los recursos de 42 países. Su objetivo es satisfacer los requerimientos de las diferentes comunidades científicas en el marco del área Europea de Investigación (ERA), permitiendo el uso de recursos de computación distribuidos por todos esos países a través de internet, de forma que usando simplemente el propio ordenador se puede acceder a una potencia de cálculo casi ilimitada. Opera sobre la infraestructura Enabling Grids for E-science (EGEE), con un software para monitorización y accounting desarrollado por el CESGA.

DEISA

Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications (Infraestructura Europea Distribuida para Aplicaciones de Supercomputación). Consorcio formado por centros de supercomputación líderes en sus respectivos países que aspira a dar soporte a la ciencia computacional más avanzada del mundo desde Europa. Sus expectativas están puestas en proporcionar la solución operativa para el Ecosistema Europeo de Supercomputación, basado en una especie de sistema Grid en el que se interconectarán los recursos de supercomputación de los centros mejor dotados del continente, alcanzando así una potencia de cálculo enorme al servicio de la comunidad científica y la industria.

Ibergrid

Iniciativa conjunta de los Gobiernos de España y Portugal puesta en marcha en 2007 y que tiene como objetivo promover e implantar un espacio común ibérico de investigación. Contempla actividades dirigidas a potenciar la movilidad de investigadores, desarrollar proyectos de investigación coparticipados por científicos de ambos países y compartir infraestructuras de cálculo de altas prestaciones. En esta iniciativa participan por parte de España la práctica totalidad de los integrantes de la Red e-Ciencia, estando abierto, por parte de Portugal, a la totalidad de la comunidad académica y científica portuguesa.



EN GALICIA

CESGA

Centro de Supercomputación de Galicia

Comenzó su trayectoria en 1993 dando servicio a las Universidades de Vigo, A Coruña y Santiago de Compostela y a los centros del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). En 2008 inauguró su actual supercomputador, el Finis Terrae, con una capacidad 10.000 veces superior a la del primero, el instalado quince años antes. El nuevo supercomputador colocó al CESGA en el número 100 del TOP 500 mundial durante su primer semestre en activo.

EN ESPAÑA

● Centros de supercomputación autonómicos que prestan servicio a terceras instituciones

■ Comunidades autónomas con centros autonómicos

● Instalaciones Científico-Técnicas Singulares (ICTS) del Estado

Reconocidas oficialmente como infraestructuras que proporcionan recursos o servicios que la comunidad científico-tecnológica española necesita para desarrollar su investigación de vanguardia y de máxima calidad (www.micinn.es).

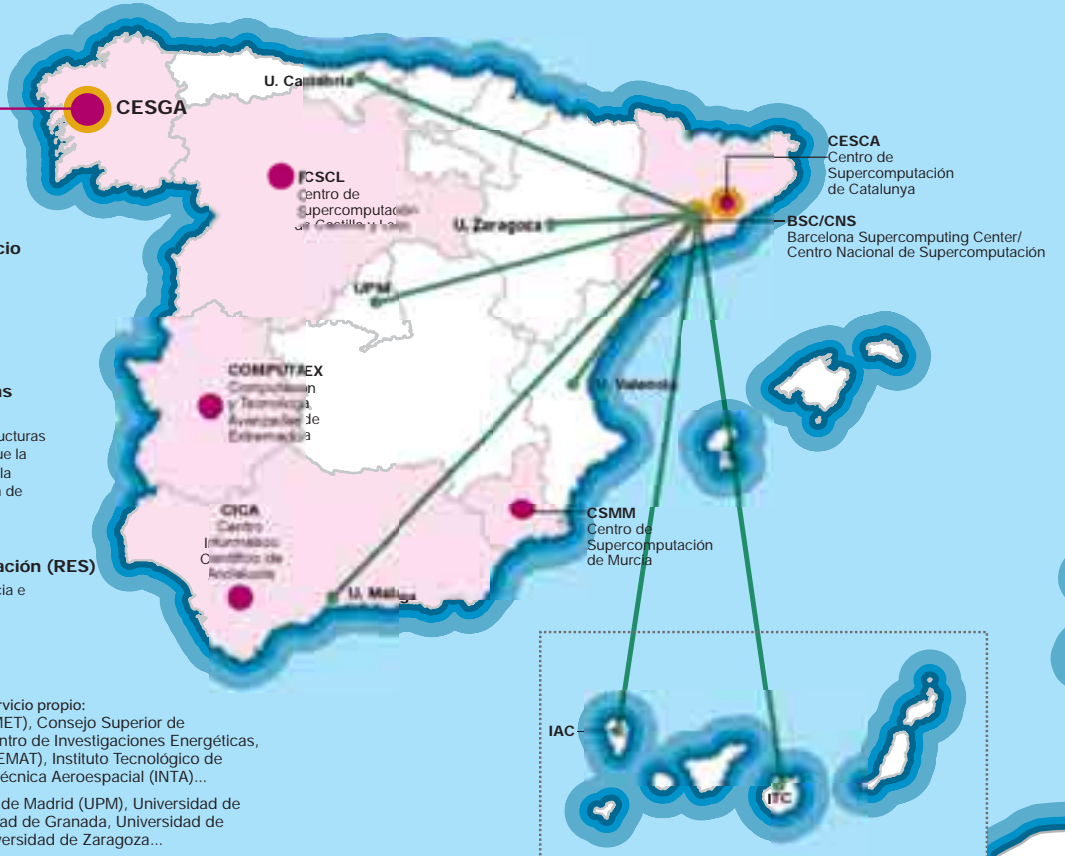
● Red Española de Supercomputación (RES)

Red promovida por el Ministerio de Ciencia e Innovación

ADEMÁS

Centros con supercomputadores para servicio propio: Agencia Estatal de Meteorología (AEMET), Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), Instituto Tecnológico de Canarias (ITC), Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA)...

Universidades: Universidad Politécnica de Madrid (UPM), Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM), Universidad de Granada, Universidad de Málaga, Universidad de Valencia, Universidad de Zaragoza...



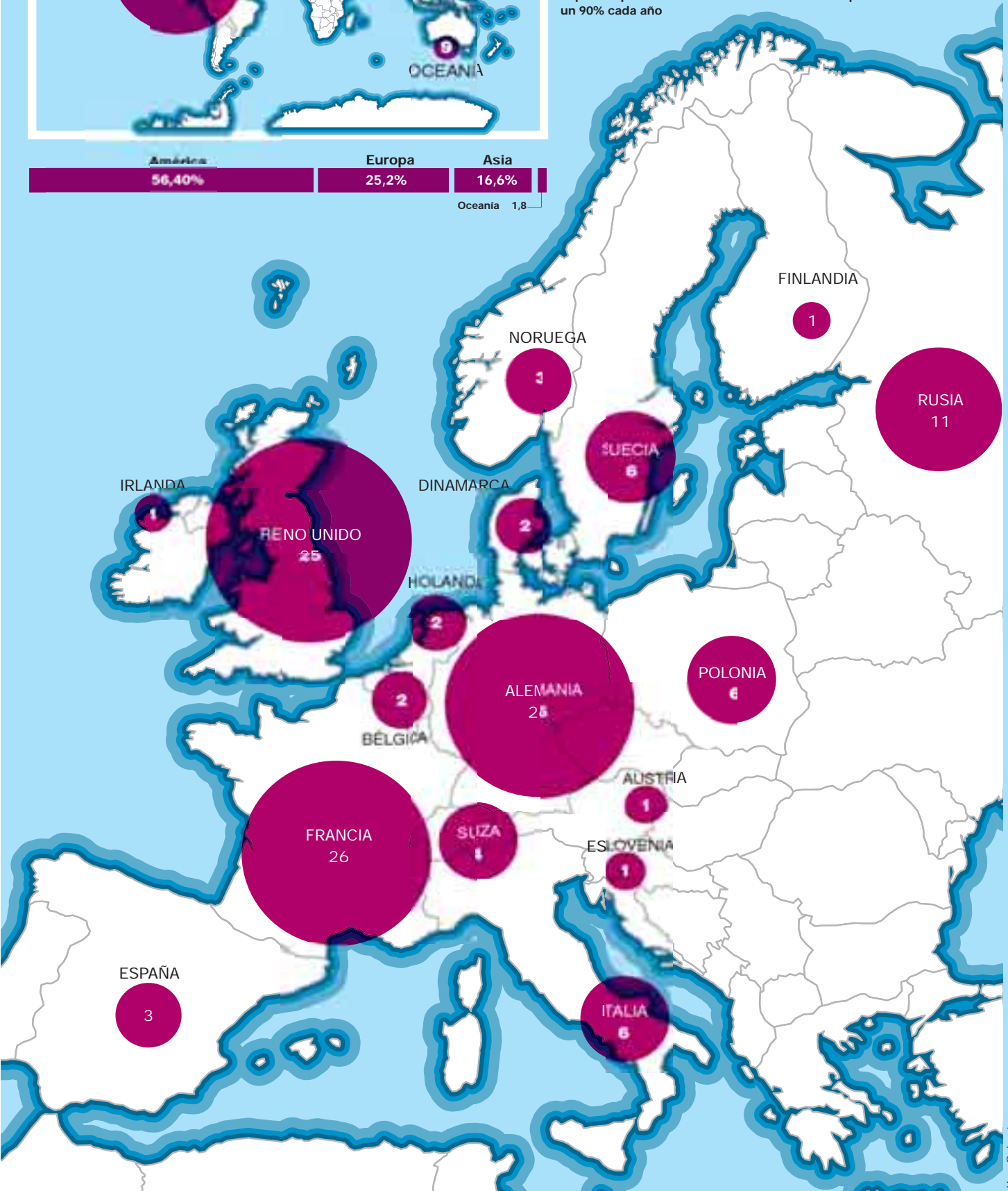


TOP 500 www.top500.org

Distribución por continentes y por países europeos

Listado actualizado cada semestre en el que figuran los 500 supercomputadores más potentes del mundo. Se elabora desde 1993 con las contribuciones de expertos en supercomputación, científicos usuarios y fabricantes. Los datos se refieren a noviembre de 2010.

Un análisis de los datos globales sobre los centros recogidos en la lista hasta 2006 reflejaba que la potencia total de las máquinas de supercomputación en el mundo se incrementa aproximadamente un 90% cada año



Publicación divulgativa editada
por la **Fundación CESGA**

Centro de Supercomputación de Galicia

Avda. de Vigo, s/n (Campus Vida)

15705 Santiago de Compostela

info@cesga.es

www.cesga.es

Enero de 2011



Con el apoyo de la Rede GHPC



Realización:  **Growcom SL**

Los textos incluidos en esta publicación son propiedad de la Fundación CESGA, que los pone a disposición bajo licencia *creative commons* reconocimiento-*NoComercial-CompartirIgual*. Es usted libre de copiar, distribuir y comunicar públicamente estos textos y hacer con ellos obras derivadas bajo las condiciones siguientes: debe reconocer los créditos de la obra de la manera especificada por el autor o el licenciadador (pero no de una manera que sugiera que tiene su apoyo o apoyan el uso que hace de su obra). No puede utilizar esta obra para fines comerciales. Si altera o transforma esta obra, o genera una obra derivada, sólo puede distribuir la obra generada bajo una licencia idéntica a ésta. Las imágenes incluidas en esta obra son propiedad de sus autores y se encuentran sujetas a contratos de licencia, por tanto queda prohibida su copia, distribución o uso para realización de obras derivadas.