
Introdución

- Actualizado (18.11.2005)

Os superordenadores son ferramentas para a creación e o desenvolvemento de simulacións e modelos de estados e procesos. Os usos e o aproveitamento do rendemento destas potentes ferramentas dependen fundamentalmente da pericia, a imaxinación e o esforzo dos nosos investigadores.

Os superordenadores utilízanse a cotío para:

- Predicir o comportamento dos mercados de valores internacionais
- Deseñar novos materiais e fármacos
- Elaborar prediccións meteorolóxicas
- Investigar factores relacionados co cambio climático
- Deseñar e predicir o comportamento de materiais
- Estudiar a propagación de enfermidades epidémicas
- Realizar cálculos de estruturas, estudar tensións, predecir a propagación de fracturas
- Analizar o comportamento de fluídos, deseñar pezas aerodinámicas, etc.
- Etc.

A modelización por ordenador dunha gran variedade de sistemas físicos acadou o punto no que a realidade pode agora ser simulada cun alto grao de fiabilidade. Os modelos físicos de sistemas reais, xa sexa a atmósfera, a turbulencia, o caos, a combustión en sistemas químicos/mecánicos, os vehículos automotores e aeroespaciais, as máquinas, as moléculas de proteínas, os procesos industriais ou económicos, etc., poden ser suficientemente detallados para utilizarse para prediccións verídicas. Deste xeito, a computación avanzada é un instrumento para o desenvolvemento da sociedade e para a competitividade industrial a tódolos niveis, e non está limitada a un sector industrial específico.

A simulación empregando superordenadores complementa (cando non reempraza) cada vez máis os experimentos e os modelos a escala nun amplo rango de aplicacións científicas, de enxeñaría e comerciais. Nalgunhas áreas industriais, como o deseño de avións, vehículos espaciais, grandes estruturas resistentes, barcos e coches é xa unha necesidade ineludible. Noutras, os científicos e enxeñeiros están realizando grandes avances no deseño de moléculas para medicamentos, enzimas, catalizadores e novos materiais. O tempo transcorrido desde a concepción dun novo produto ata a súa introdución no mercado e o custo do seu proceso de deseño pódense reducir drásticamente coa axuda da simulación por ordenador. Todo isto, combinado coa exactitude alcanzada en reproducir a realidade, ten o efecto de aumentar substancialmente a competitividade da industria ao reducir custos e mellorar a calidade. Ao mesmo tempo existen áreas onde os superordenadores deben utilizarse para establecer os métodos e modelos de simulación física máis eficientes.

O impacto na sociedade dos superordenadores non está limitado aos seus beneficios na industria, o comercio e os

servizos. Inclúe o estudo da propagación de enfermidades, o recoñecemento e tradución de linguaxes naturais, os cambios globais do clima ou a complexa dinámica dos sistemas económicos. É ben coñecido que os principais problemas que afectan a nosa sociedade son de natureza mundial e necesitan estudarse e resolverse a esta escala.

En moitos casos, a ausencia de datos completos, como os referentes á atmosfera e á biosfera, ou á poboación mundial, fai que se desesenvolvan criterios subxectivos para realizar predicións. Isto require a comprensión de sistemas moi complexos, con comportamentos soamente predicibles con precisión por medio dunha modelización detallada empregando ordenadores de altas prestacións.

A continuación explícanse algúns exemplos de interese.

A xestión ambiental (atmosfera/auga/terra) e a predicción do cambio climático é un exemplo característico. Distintas organizacións gubernamentais xa investiron grandes sumas en novas técnicas para observar a atmosfera e o océano e en novos programas de investigación enfocados a avaliar o efecto do xénero humano no medio. Así é ben coñecido, que os modelos numéricos da atmosfera e do océano xogan un importante papel no estudio do clima. Non obstante, por exemplo, a avaliación completa da resposta global e rexional do efecto invernadoiro debido ao aumento da concentración de gases proveniente de fontes antropoxénicas, requirirá o uso de modelos climáticos máis sofisticados que os existentes. Hoxe son necesarios aumentos significativos na precisión e no uso de modelos computacionais da física e da química moito máis precisos e cun maior custo computacional.

Outro exemplo típico é o deseño de novas moléculas ou materiais, básico para as industrias química e farmacéutica. Combinado con desenvolvementos en biotecnoloxía, pódense deseñar e producir novas proteínas, obténdose novos produtos que terán impacto na vida cotiá. As estratexias tradicionais para o deseño de novos compoñentes involucra métodos intelixentes de proba e erro. A modelización computacional está tan só comezando a ter impacto no proceso de deseño. Sen embargo, este deseño aínda consume moito tempo e diñeiro. Un aumento considerable na potencia computacional é necesario para acelerar o deseño de novos produtos, o que permitirá un maior nivel de competitividade na nosa industria química. Ao desenvolverse totalmente, os modelos computacionais incorporarán unha combinación de simulación, busca en bases de datos e visualización, e aforrarán ao deseñador tempo de experimentación no laboratorio coa conseguinte redución do custo. Isto requirirá aumentar polo menos mil veces a potencia computacional dispoñible actualmente. Prevese que a aplicación das técnicas de modelación molecular a este nivel será imperativo para que as industrias química, farmacéutica e biotecnolóxica poidan seguir sendo innovadoras e competitivas a nivel internacional.

A optimización é outro exemplo da necesidade de dispor de modelos matemáticos precisos da realidade e de ordenadores potentes. A optimización é unha aplicación relativamente nova para os superordenadores e é cada vez máis importante nas operacións de grandes industrias e compañías de servizos. A solución de grandes problemas de optimización é case sempre crítica: as decisións débense tomar en tempo real para responder a situacións que evolucionan rapidamente. A diferenza entre boas solucións destes problemas e solucións óptimas ou próximas á óptima, poden significar o aforro de grandes sumas de diñeiro. As principais aplicacións da optimización inclúen o deseño de formas estruturais complexas, a planificación do investimento, a planificación e distribución da produción, o trazado de estradas, a planificación de rutas e de persoal, etc. A axuda dos superordenadores a través dunha mellor interacción investigador ordenador dá un realce esencial ao poder creativo do ser humano e permite incorporar ás decisións de deseño un maior conxunto de elementos concretos de importancia técnica, económica e empresarial.

A Intelixencia Artificial (IA) beneficiarase do procesamento simbólico grazas aos superordenadores de altas prestacións, a IA produce aplicacións de certo, aínda que limitado, valor comercial, pero trae consigo a perspectiva de aplicacións máis atractivas comercialmente se o procesamento rápido requirido, unido a un software sofisticado e sistemas de bases de datos flexibles pode obterse a un custo aceptable. Exemplos deste tipo de aplicacións poderían ser os sistemas de linguaxe natural en tempo real, as técnicas de toma de decisións en problemas combinatorios, como problemas de programación en tempo real, os modelos para análise financeira e moitas outras.