

Alfonso Tarancón Lafita

Doctor en Ciencias Físicas. Profesor Titular de Física Teórica

Departamento de Física Teórica. Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos Universidad de Zaragoza



EL ORDENADOR COMO UNIVERSO DONDE MEDIR

Cuando la Física se enfrenta a un fenómeno nuevo, lo primero es la observación detallada del mismo: la medida. Así es como cuantificó Galileo el movimiento sobre planos inclinados, o como se mide en la actualidad la Radiación de Fondo. La medida nos dice la forma en que se comporta la Naturaleza y es el juez inapelable de las Teorías elaboradas por el hombre para explicarla.

Con el devenir de los tiempos, las leyes básicas son cada vez mejor conocidas y explican más hechos experimentales, produciéndose menos cambios en ellas. Por el contrario, los fenómenos a que se aplican son más complejos, matemáticamente más intrincados. Se da la circunstancia de que, aún sabiendo las leyes básicas subyacentes, no disponemos de herramientas para resolver las ecuaciones y obtener las predicciones necesarias.

Podríamos hacer un símil con la situación en que se encontraba Newton al enunciar la Ley de Gravitación Universal: conocía las leyes fundamentales de la Mecánica y la Gravitación, sabía que para calcu-

lar el efecto de la Tierra sobre una partícula debería “sumar” el efecto de toda la masa de la Tierra, pero en ese momento no existían herramientas matemáticas para hacer esta suma.

Hoy, para la mayoría de los problemas planteados en la Ciencia y la Tecnología no somos capaces de encontrar solución analítica. El cálculo numérico nació con este objetivo: dado un problema físico convertido en un problema matemático correctamente planteado, si no existe solución analítica del mismo, usamos el ordenador para obtener la solución más aproximada posible a la real. La resolución de ecuaciones diferenciales es tal vez el mejor candida-

to, y fue uno de los primeros problemas atacados.

Un poco de Historia

El primer ordenador de propósito general fue el ENIAC (1946-1955) usado por la Armada estadounidense para cálculos de balística, predicción del tiempo, desarrollo de la primera bomba de hidrógeno, generación de números aleatorios... Era capaz de realizar la increíble cantidad de 5000 sumas o 40 divisiones por segundo. No estaba mal para aquellos tiempos... y sus 27 toneladas de peso.

En España, el cálculo numérico se generalizó en las Universidades a finales de los años 70. Entonces

sólo había programas escritos en FORTRAN cuyo resultado final era un listado de números en un papel. El programa se escribía a mano sobre un folio y, tras mirarlo fijamente durante horas tratando de convencerse a sí mismo de que todo estaba bien, se tecleaba sobre una terminal mecánica que generaba fichas perforadas, una por cada línea del programa. Con cariño, se unían las tarjetas con una goma elástica y se esperaba pacientemente la llegada, una vez por semana, de un señor con un maletín, que recogía los tacos de fichas y los transportaba a alguno de los pocos lugares donde por aquel entonces estaban ubicados los ordenadores; allí se introducían en un lector para su compilación y, en el improbable caso de que todo fuera bien, para su posterior ejecución. Pasado un plazo razonable (entre dos días y una semana) el señor volvía con un listado en papel continuo, generalmente con dos hojas: la primera identificaba al usuario con grandes letras construidas con letras, la segunda contenía algo parecido a "Compilation error: Line 43 syntax error" Otra vez a empezar...

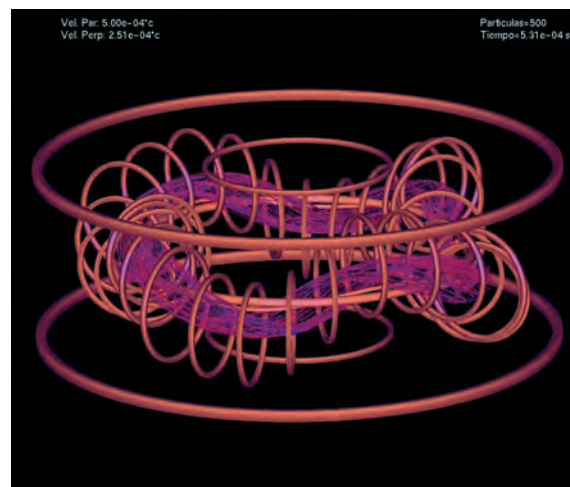
Desde entonces se ha venido produciendo un explosivo (en concreto, exponencial) crecimiento de las prestaciones de los ordenadores, que es típico en el nacimiento de una tecnología.

Sin remontarnos a la prehistoria, los primeros superordenadores de propósito general gozaban a finales de los 80 de una potencia en torno a los 100 Mflops (millones de operaciones en coma flotante por segundo) y una memoria RAM

sobre los 100 Mbytes, costando del orden de cientos de millones de pesetas. Los sistemas de almacenamiento eran entonces caros e irrisorios. Recuerdo que, en la Universidad de Roma, en 1989 esperábamos con ansiedad la llegada de un "superdisco duro". Era un armario (con ruedas, por supuesto) de medio metro cúbico y precio exorbitado con una capacidad de 1 Gbyte. Algo que hoy en día llevan (siempre lleno) los adolescentes en el bolsillo para oír canciones.

Los ordenadores personales eran usados casi exclusivamente para tareas administrativas o de conexión a los grandes ordenadores. Las universidades y centros de investigación instalaron grandes ordenadores para cálculo científico en los Centros de Cálculo, de tan buenos y malos recuerdos. Los ordenadores típicos eran de escasos Megaflops, y en ellos se hacían decenas o incluso cientos de investigadores ávidos de entrar en una saturada cola para lograr el listado de números que debería dar respuesta a sus inquietudes. Fue una época excitante pero llena de conflictos y frustraciones.

Entonces los PC's comenzaron a llenar el mundo. Gracias a la producción masiva los procesadores comerciales disminuyeron su precio, y aumentaron su potencia por las demandas de cálculo de programas de consumo tales como los videojuegos. La electrónica de consumo pudo con todos los desarrollos específicos. No en vano la producción anual de procesadores Intel o similares para consumo doméstico se sitúa en torno a los 200 millones. Y se produjo lo inimaginable: los orde-



nadores que tenían los jóvenes en su casa para jugar fueron alcanzando en potencia a los superordenadores de los Centros de Cálculo.

El desarrollo del Software Libre, con Linus Torvalds y Richard Stallman a la cabeza, permitió disponer de un sistema operativo potente (Linux) y aplicaciones robustas que cubrían gran parte de las necesidades (GNU). Empezaron a aparecer superordenadores basados en procesadores comerciales: el abandono en las grandes empresas del desarrollo de procesadores propios para pasar a usar los procesadores comerciales de gran consumo fue un momento de cambio económico y de filosofía importante. Y, paralelamente, se comenzaron a desarrollar superordenadores fabricados con pilas de PC's comerciales: un "hágase usted mismo su superordenador".

De modo que, ahora, el mundo de los superordenadores está dominado por grandes infraestructuras y por Clusters de PC's, que en ambos casos son esencialmente ordenadores personales uno junto al otro con hardware específico para la ⇒

En España disponemos de una gran infraestructura: el ordenador Mare Nostrum en el Barcelona Supercomputer Center, que da servicio a diferentes grupos de investigadores en una gran variedad de campos.



comunicación. En todos ellos la pieza básica, el procesador, es de gran consumo. Procesadores comerciales con una potencia superior al Gflop (mil millones de operaciones en coma flotante por segundo).

En España disponemos de una gran infraestructura: el ordenador Mare Nostrum en el BSC (Barcelona Supercomputer Center). Da servicio a diferentes grupos de investigadores en una gran variedad de campos. Esta máquina tiene sentido especialmente para problemas en los que los requerimientos de potencia y memoria son enormes, de modo que no pueden ser ejecutados en otras máquinas más reducidas. Los investigadores no ejecutan en Mare Nostrum el trabajo diario, sino procesos especiales que lo requieren.

Contamos también con un buen número de centros de tamaño medio que disponen de Clusters de PC's bajo Linux casi en su totalidad, con entre cien y mil procesadores que resuelven los problemas cotidianos de nuestros investigadores: el CESGA (Galicia), el IFCA (Cantabria), el CIEMAT (Madrid) o el BIFI (Aragón) son algunos de ellos.

Típicamente, los procesos se desarrollan y depuran en ordenadores per-

sonales, para luego pasar a ser ejecutados en Clusters de PC's en algún centro de computación. Sólo en algunos casos, después de esto, es necesario aumentar la potencia de cálculo para redondear o finalizar los cálculos; para ello se usa el Mare Nostrum u otro ordenador similar. Disponer de grandes ordenadores es hoy una señal de prestigio para un país. Situarse en buena posición en la lista de los Top 100 es algo codiciado por todos los Centros e incluso por los Gobiernos.

La Medida y la Simulación

Estos desarrollos han producido, en lo que nos interesa en este artículo, varios hechos fundamentales:

Sustitución de experimentos reales por experimentos virtuales

Antes de la llegada de los modernos ordenadores los científicos no se planteaban siquiera ciertos problemas, pues sabían que eran imposibles de atacar a pesar de disponer de la teoría básica. Por ejemplo, las leyes de la Hidrodinámica son perfectamente conocidas, pero resolver el problema de cómo el viento afecta a un vehículo es imposible con las técnicas analíticas.

Actualmente los ordenadores se han convertido en verdaderos instrumentos de medida. El binomio Teoría-Naturaleza se ha modificado en parte a Teoría-Simulación-Naturaleza, pues es posible simular hechos naturales con tal fidelidad que obtenemos con el ordenador los mismos resultados que haciendo un experimento de campo.

Dicho de otro modo: el proceso de medida, básico para el conocimiento de la Naturaleza, dispone de una

herramienta más para obtener resultados: la Simulación.

Hoy en día todo se puede simular (y casi todo se simula). Algunos ejemplos:

- Aerodinámica de vehículos terrestres, aéreos y marítimos.
- Desarrollo de nuevos fármacos: interacción con proteínas.
- Comportamiento y resistencia de materiales.
- Evolución del Tiempo y del Clima.
- Formación de Galaxias.
- Fenómenos Sociales, políticos y económicos.
- Tráfico vehicular, peatonal o de información.

Se simula incluso si en una carrera de Fórmula 1 es mejor hacer 2 ó 3 stops, o cuál será el cambio en la demanda eléctrica en un país según el calendario de la liga de fútbol. Estas simulaciones permiten saber lo que pasará según ciertos parámetros de control. Son por tanto genuinas medidas experimentales, pero anteriores al hecho en sí, lo que proporciona una enorme capacidad de trabajo y de anticipación.

En todos los casos se tiene la sensación de que cada vez las predicciones son más ajustadas y que con el paso del tiempo será posible predecirlo todo... Tal vez estamos llegando a la situación que, a finales del siglo XVIII, le permitía afirmar a Laplace que con la Mecánica Clásica y algo de paciencia era posible saberlo todo sobre el Universo... se equivocaba completamente.

Inteligencia Artificial y modelos Ad Hoc

No sólo en Simulaciones se han producido grandes avances, tam-

Disponer de grandes ordenadores es hoy una señal de prestigio para un país. Situarse en buena posición en la lista de los Top 100 es algo codiciado por todos los Centros e incluso por los Gobiernos.

La medida nos dice la forma en que se comporta la Naturaleza y es el juez inapelable de las Teorías elaboradas por el hombre para explicarla.



bién en otros aspectos. La “Inteligencia Artificial” despertó un enorme interés al inicio de los 90. Las expectativas no se han cubierto completamente, pues el campo es más duro de lo que parecía, pero el avance es innegable. El reconocimiento de imágenes, diagnósticos médicos como identificación de tumores, la búsqueda de patrones, el análisis de mercados, la teoría de juegos, todos ellos son campos en rápida evolución.

En segundo lugar, se crean modelos ad hoc, modelos que viven sólo dentro del ordenador. Muchos investigadores han roto con el antiguo esquema que postulaba que para describir la realidad era necesario escribir en blanco sobre negro unas ecuaciones que luego lo resolvían todo. Los ordenadores han permitido llegar a un nuevo empirismo donde es posible describir el comportamiento de un sistema con unas cuantas normas copiadas de la realidad, y luego dejar que el ordenador haga el resto. Este empirismo nace de la imposibilidad de encontrar teorías básicas (simulación del tráfico vehicular o de información) o de la complejidad de la teoría subyacente (es el caso de la Dinámica

Molecular, que sustituye la Mecánica Cuántica por modelos efectivos más simples para poder ser tratados en el ordenador).

El GRID: una tecnología emergente

El aumento de la potencia disponible, el desarrollo de software que hace más simple el uso de los superordenadores, el aumento de investigadores, el desarrollo de nuevas herramientas numéricas, de nuevos modelos para describir fenómenos, de programas comerciales potentes (Gaussian, Charm...) está aumentando enormemente la demanda de cálculo. Se piden resultados más precisos y en menos tiempo. Se quiere que cálculos que ahora cuestan días o meses cuesten minutos. Todas las ramas de la investigación se suman a la demanda del tiempo de cálculo.

Los centros de computación de gran volumen son costosos en su creación, mantenimiento y actualización, y sólo un número reducido de ellos es posible. Por el contrario, los centros de tamaño medio se generalizan por toda la geografía europea y del resto de países desarrollados.

Integrando todo lo anterior, se está desarrollando una nueva tecnología que pretende poner a disposición de los investigadores potencias de decenas de miles de procesadores usando los Centros de Computación dispersos por el mundo: las tecnologías GRID. Se trata de poner a punto un hardware y un software que permitan agrupar los recursos de decenas o cientos de centros de computación en cualquier lugar del planeta y ponerlos a disposición del usuario de forma transparente, de modo que sean para él como un solo superordenador.

Para ello hace falta el desarrollo de redes de comunicación más rápidas, software potente para integrar los recursos, sistemas de seguridad infalibles, aplicaciones que puedan ejecutarse en un entorno distribuido, etc. La Comunidad Europea ha apostado fuertemente por estas tecnologías emergentes y pronto podremos ver los primeros resultados obtenidos en la GRID, en temas relacionados con fusión, medicina o bioinformática. ■

“Para saber más”

ENIAC Museum Online:
<http://www.seas.upenn.edu/~museum/>
Barcelona Supercomputing Center,
Centro Nacional de Supercomputación:
<http://www.bsc.es>
Centro de Supercomputación de Galicia:
www.cesga.es
Instituto de Física de Cantabria:
www.ifca.unican.es
CIEMAT, Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas:
www.ciemat.es

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza:
<http://bifi.unizar.es>
Top 500 Supercomputer Project:
<http://www.top500.org/list/2006/06/100>
Enabling Grids for E-science (EGEE) project:
<http://public.eu-egee.org>
Interactive European Grid Project:
<http://www.interactive-grid.eu/>