

Matemáticos españoles hallan soluciones a un problema clave gracias al superordenador FinisTerra

- **El problema de los puntos de Fekete tiene un siglo de edad**
- **El trabajo demuestra la alta capacidad de FinisTerra, el superordenador con mayor memoria compartida de Europa**
- **Se ha construido un algoritmo con aplicaciones en muchas áreas, y que además sirve para abordar otro problema esencial para el siglo XXI: el ‘problema 7 de Smale’.**

Si tenemos una serie de partículas que ejercen influencia las unas sobre las otras, por ejemplo partículas con carga eléctrica, ¿cómo se distribuyen sobre la superficie de un objeto de forma que se *molesten* lo menos posible –es decir, de forma que las interacciones entre unas y otras, compensándose, alcancen un estado de equilibrio--? Es un problema de hace un siglo, que se vuelve menos tratable conforme aumenta el número de partículas y más complicado es el objeto sobre el que deben disponerse. Matemáticos españoles han construido un algoritmo que da soluciones para decenas de miles de partículas, y para muchos más objetos que los jamás ensayados. Demostrar este algoritmo, que también abre una vía de acceso a otro problema de los considerados más importantes para el siglo XXI, ha servido además para poner a prueba al superordenador FinisTerra.

Un ordenador no resuelve un problema si no hay un matemático detrás, y a menudo esa regla también se cumple a la inversa. Por ejemplo, los ordenadores son indispensables cuando hace falta mucha capacidad de cálculo. Por eso cuando los responsables del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) buscaban un reto para el superordenador FinisTerra, durante su periodo de pruebas, decidieron recurrir a las matemáticas.

Reto para el FinisTerra

Los matemáticos de la Universidad Politécnica de Cataluña (UPC) Enrique Bendito, Ángeles Carmona, Andrés M. Encinas y José Manuel Gesto propusieron el problema con que arranca esta nota, llamado ‘de los puntos de Fekete’. En términos más precisos, el problema “consiste en

determinar la posición de un cierto número de puntos sobre un objeto, de manera que la energía potencial producida por la interacción de dichos puntos sea mínima”, explica Bendito.

Este grupo de la UPC ha desarrollado un algoritmo que da soluciones para una amplia gama de geometrías y diferentes tipos de interacción entre las partículas. Para demostrarlo --con una evidente carga lúdica-- lo han aplicado a objetos como plátanos, manzanas o poliedros (Ver imágenes adjuntas). Además, algo esencial: con el nuevo algoritmo, los tiempos de cálculo para obtener estas configuraciones no son elevados.

En ordenadores convencionales el nuevo algoritmo había generado ya resultados valiosos, publicados en 2007 en la revista *Journal of Computational Physics*. Pero recurriendo a la enorme potencia de cálculo de FinisTerrae los matemáticos de la UPC han podido probar su algoritmo con un número de puntos mucho mayor.

Efectivamente, lograron hallar configuraciones “en equilibrio” sobre la esfera hasta con 50.000 puntos. Es más, para poner a prueba la capacidad del algoritmo llegaron a abordar el problema hasta con un millón de puntos. “Con el FinisTerrae constatamos claramente que nuestro algoritmo es robusto, versátil y eficiente”, explica Gesto.

El grupo lleva cinco años trabajando con este algoritmo, que tiene aplicaciones “en estudios de conformación de moléculas y estructuras cristalinas, de gases, virus, proteínas, bacterias”, señala Bendito.

350.000 horas de cálculo

Además, los matemáticos sabían que buscando puntos de Fekete con el FinisTerrae podían abordar otro problema clave de las matemáticas modernas: el ‘problema 7 de Smale’. A finales del siglo XX la Unión Matemática Internacional preguntó cuales serían los principales problemas que heredaría el siglo XXI; el prestigioso matemático Stephen Smale produjo una lista de 18 problemas, de los que el séptimo está íntimamente ligado a los puntos de Fekete: plantea la posibilidad de hallar configuraciones “suficientemente próximas” a las óptimas sobre una esfera en tiempo polinómico. Estas configuraciones cercanas a las óptimas servirían, dentro de un programa ambicioso y complejo, de punto de partida para resolver determinados sistemas de ecuaciones.

Así, gracias a FinisTerrae y al nuevo algoritmo se han obtenido más de 50 millones de formas de disponerse los puntos sobre la esfera, “la mayor muestra obtenida hasta el momento sobre el problema 7 de Smale”, afirma Gesto.

El trabajo con el superordenador, que llevó dos semanas en febrero, exigió unas 350.000 horas de cálculo; de haberse usado sólo una de las CPUs del FinisTerrae, hubiera hecho falta nada menos que 40 años. En el cálculo con un millón de puntos, 1.024 CPUs trabajaron en paralelo durante día y medio.

Según el CESGA, “este reto ha demostrado la alta capacidad de cálculo” de FinisTerrae, el superordenador de mayor de memoria compartida de Europa.

IMÁGENES

Se puede descargar figuras donde se muestra la disposición de los puntos gracias al nuevo algoritmo aquí:

<http://www.i-math.org/?q=es/node/1078>

PIES DE FOTO:

-Bodegón: La manzana entera, el plátano y la manzana mordida, juntos en el bodegón, tienen 1500, 1500 y 2500 puntos respectivamente, con energía potencial electrostática.

-Plátano: contiene 1500 puntos, con una energía potencial que hace que los puntos se equidistribuyan independientemente de las dificultades geométricas.

-Manzana: 500 puntos, con una energía potencial que hace que los puntos se equidistribuyan independientemente de las dificultades geométricas.

-Poliedro: sobre él hay 10.000 puntos en equilibrio con energía potencial electrostática.

CESGA

El CESGA (www.cesga.es) es una Instalación Científico Técnica Singular (ICTS) que da servicio de computación y comunicaciones de altas prestaciones a la Comunidad Científica Gallega y al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). El Centro de Supercomputación de Galicia es una institución participada por la Xunta de Galicia (a través de su Consellería de Innovación e Industria) y por el CSIC. Está en Santiago de Compostela. Por parte del CESGA han participado en el trabajo reseñado en esta nota Andrés Gómez, Carlos Mouriño y M^a Teresa Sánchez.

i-MATH

Los matemáticos autores de este trabajo forman uno de los más de 300 grupos de matemáticos españoles integrados en el proyecto CONSOLIDER Ingenio MATHEMATICA (i-MATH) (<http://www.i-math.org>). El objetivo básico de i-MATH es incrementar cualitativa y cuantitativamente el peso de las matemáticas en el panorama internacional y en el sistema español de ciencia, tecnología, empresa y sociedad. El CESGA es uno de los cinco nodos de i-MATH (<http://matematica.nodo.cesga.es>).

VARIDIS

Los matemáticos de la Universidad Politécnica de Cataluña (UPC) Enrique Bendito, Ángeles Carmona, Andrés M. Encinas y José Manuel Gesto forman parte del grupo de investigación VARIDIS: <http://www-ma3.upc.es/users/bencar/>

Otros links:

Lista de S. Smale: <http://www.rsme.es/gacetadigital/abrir.php?id=235>

GABINETE DE COMUNICACIÓN de i-MATH
(CONSOLIDER INGENIO MATHEMATICA)

Divulga

C/Diana 16, 1ºC. 28022 MADRID

Tfno: 917424218

matematicas@divulga.es

Mónica Salomone: 649 934 887

Ignacio Bayo: 610 908 224

CESGA:

Tfno: 981 569 810

promocion@cesga.es