

# Área temática de sistemas complejos

## 1. Motivación de un entorno Grid

### 1.1 Necesidades computacionales en el estudio de sistemas complejos.

No existe una definición precisa de sistemas complejos pero por este tipo de sistemas se suelen entender aquellos en los que la dinámica está gobernada por ecuaciones no lineales presentando comportamientos caóticos, a menudo de alta dimensionalidad. Estos sistemas pueden estar formados por muchos elementos en interacción y es característico que el comportamiento del sistema global trascienda las expectativas generadas por la inferencia directa a partir de los comportamientos individuales.

Típicamente este comportamiento cooperativo emergente viene condicionado más por características globales del sistema, como son sus simetrías, dimensionalidad, topología de la interacción entre componentes, ... que por la dinámica individual.

Por ello sistemas pertenecientes a áreas de conocimiento diversas como es el caso de sistemas hidrodinámicos, sistemas ópticos no lineales, medios granulares, sistemas y circuitos electrónicos, sistemas optoelectrónicos, reacciones químicas, sistemas biológicos, redes de comunicación, ... pueden mostrar dinámicas globales, e inestabilidades parecidas. Surge entonces de forma natural la pretensión de intentar comprender este tipo de fenomenologías en su conjunto, intentando extraer comportamientos universales que puedan ser luego aplicados a otros sistemas parecidos. Es por tanto esta una ciencia interdisciplinar que desde su propia definición de objetivos pretende romper con las divisiones que tradicionalmente separan y delimitan las diversas áreas de conocimiento y que aspira a tender puentes por los que ideas de disciplinas dispares circulen de forma fluida y beneficien al desarrollo de cada disciplina específica.

Dentro de este contexto, la computación juega un papel crítico en la comprensión de los fenómenos emergentes globales. Dada la naturaleza no lineal y la complejidad de la dinámica en muchos casos sólo la computación numérica intensiva es capaz de aportar luz sobre comportamientos a gran escala. La dependencia espacial típicamente presente en estos sistemas así como la necesidad de abordar comportamientos a escalas de tiempo muy diversas supone un reto computacional importante. Movimientos de interfases, frentes o ondas de choque o formación de vórtices, estructuras localizadas o solitones en sistemas extendidos requieren por ejemplo de una elevada resolución espacial al tiempo que el estudio de la dinámica de estas estructuras a gran escala y su interacción con otras estructuras similares requieren sistemas de gran tamaño. Y si se quiere entender el comportamiento global, no basta con integrar las ecuaciones dinámicas para un valor dado de los parámetros. Lo crucial es el conocimiento de las inestabilidades y bifurcaciones que surgen al cambiar los parámetros de control del sistema.

Por otro lado no existe el sistema complejo prototípico como tal ni por tanto un programa válido para el estudio de los comportamientos cooperativos en cualquier sistema complejo. La diversidad subyacente en esta ciencia ha motivado descripciones en términos diversos, desde mapas acoplados a ecuaciones en derivadas parciales, pasando por ecuaciones diferenciales estocásticas. Y es que si bien el comportamiento emergente global puede ser común, el modelaje numérico de cada sistema particular

tiene que ser adecuado y realista para el mismo si se quiere cumplir con la pretensión de ayudar al desarrollo de la ciencia en disciplinas específicas y en el abordaje problemas concretos.

## 1.2 Justificación del GRID como solución

Son muchos los grupos científicos en distintas partes del mundo trabajando en este tipo de problemas. Para ello solo basta con ver el crecimiento experimentado en los últimos años por una revista netamente interdisciplinar y enfocada hacia este tipo de sistemas como es Physical Review E. A pesar de ello no existe una base común de aplicaciones a fin de realizar el modelaje de los distintos sistemas. Además la potencia computacional de los distintos grupos de investigación suele ser siempre limitada y en muchos casos insuficiente para abordar los problemas más complejos o explorar en detalle el espacio de parámetros. El GRID se presenta entonces como una solución dado que:

- a) En un entorno GRID se podrían crear y compartir aplicaciones de tipo general que pudiesen ser utilizadas por distintos grupos de investigación en el estudio de ciertos tipos de comportamientos.
- b) El entorno GRID permitiría desarrollar de forma eficiente cálculos intensivos o repetitivos, como es el caso de exploración del espacio de parámetros, permitiendo el aprovechamiento al máximo de los recursos computacionales existentes en distintos centros.
- c) Los datos generados en bruto podrían pasar a formar parte de una base de datos distribuida a fin de facilitar su intercambio y acceso tanto por parte de grupos propiamente dedicados al estudio de sistemas complejos, como por parte de grupos dedicados al estudio de sistemas específicos, los cuales podrían utilizar esos datos para análisis, visualización o comparación con otros resultados.

## 2. Estudio de necesidades y proyectos potenciales

### 3. Definición explícita de Use Cases

Es esta área cabe distinguir distintos tipos de procesos:

#### 3.1 Procesos que requieren computación de altas prestaciones.

En este tipo de procesos entrarían las simulaciones numéricas de la dinámica caótica en sistemas con dependencia en 2 o 3 dimensiones espaciales, en especial aquellos en los que se requiere la descripción simultánea de escalas espaciales muy diversas. Típicos ejemplos podrían ser la descripción de distintos regímenes de caos espacio-temporal en ecuaciones prototípicas (Ginzburg-Landau, Swift-Hohenberg) o en modelos de sistemas concretos (formación de estructuras e inestabilidades en reacciones químicas o en sistemas ópticos no lineales, fenómenos de turbulencia...).

### 3.2 Procesos en los que se requiere alta productividad.

Este es el caso de la exploración en el espacio de parámetros de la dinámica que presentan distintos modelos. Ello permite identificar las inestabilidades que dan lugar a la formación de estructuras espaciales por rotura espontánea de simetría, las estructuras emergentes de esta inestabilidad y en algunos casos determinar inestabilidades subsecuentes de estas estructuras. El GRID proporcionaría acceso a recursos remotos que permitirían la ejecución simultánea de muchas de estas simulaciones al mismo tiempo que se minimiza el tiempo muerto de esos recursos.

### 3.3 Acceso a grandes volúmenes de datos compartidos.

Los dos procesos anteriores serían los básicos en la primera etapa de funcionamiento de un GRID en sistemas complejos. A partir de la experiencia adquirida se podría abordar el punto c) descrito en el apartado 1.2, es decir, la constitución de una base de datos distribuida con los resultados en bruto obtenidos en simulaciones intensivas, los cuales podrían ser utilizados para visualización y análisis por diversos grupos científicos. Para ello sería necesario adoptar unos criterios básicos en la forma de almacenamiento de estos datos así como proveer de herramientas específicas que facilitasen su consulta por parte de grupos científicos trabajando en áreas específicas.

## 4. Evaluación del posible uso de middleware común

El desarrollo del Grid en sistemas complejos deberá aprovechar al máximo la estructura de middleware común a todo el entorno del proyecto.

## 5. Desarrollo previsto de middleware específico

Como ya se ha dicho el estudio de la dinámica de sistemas complejos puede hacerse en base a diversos tipos de modelos cuya implementación computacional tiene a su vez requerimientos muy diversos. A pesar de ello ciertos componentes parecen ser claramente necesarios como serían:

- Módulos de interfaz que permitiesen a los usuarios definir el modelo concreto a estudiar y el rango de parámetros en los que se quiere estudiar ese modelo.
- Módulos de cálculo que permitiesen la integración numérica de las ecuaciones diferenciales o el análisis de estabilidad mediante procedimientos semianalíticos.
- Módulos de visualización y análisis de datos. Típicamente, la gran cantidad de datos generados imposibilita su interpretación directa. La visualización y el tratamiento de estos datos son por tanto herramientas imprescindibles en la comprensión de la dinámica.

El desarrollo de distintos proyectos piloto y el interés despertado en la propia comunidad científica en las aplicaciones a sistemas concretos indicaran en que dirección es más adecuado perfilar los componentes.

## 6. Recursos de Infraestructura y humanos disponibles, dimension

## **7. Definición de posibles proyectos piloto**

Los proyectos piloto de más fácil implementación son aquellos relacionados con el punto b) desarrollado en el apartado 1.2, es decir las simulaciones numéricas en aquellos casos en los que se pretende explorar la dinámica para distintos valores de los parámetros. Es ese contexto surgen dos tipos de cálculos: los tradicionales cálculos de integración numérica de las ecuaciones de evolución dinámica y los potentes métodos semianalíticos que permiten el análisis riguroso de estabilidad en soluciones conocidas solo numéricamente.

Proyectos involucrando computación de altas prestaciones requieren de una velocidad de comunicación entre ordenadores mucho mas elevada de la que parece ser disponible en estos momentos, por lo que el cálculo paralelo en maquinas localizadas en distintos lugares se desarrollaría más adelante en función de las disponibilidades. En cualquier caso el GRID puede facilitar el acceso a este tipo de maquinas a investigadores localizados en distintas partes del mundo.

## **8. Transferencia de tecnología visibilidad y difusión de proyectos.**

La clara interdisciplinaridad de este programa de e-Ciencia lo hace abierto a un gran número de interacciones con otras ramas del mundo científico, la empresa y la sociedad en general, por lo que la difusión de los conocimientos adquiridos tanto en la elaboración del programa como en los resultados científicos que pueda dar es de gran importancia.

Para que esta difusión de conocimientos se dé propondríamos la creación de sitios web, listas de correo, foros de discusión y entornos colaborativos en los que tanto profesionales como personas simplemente interesadas pudieran acceder al conocimiento de que es objeto la ciencia de los sistemas complejos.