

FÍSICA Y COMPUTACIÓN

Joaquín Marro
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071--Granada.
jmarro@ugr.es

Se me pide reflexionar sobre física y computación para/con la comunidad de físicos españoles. La primera reflexión surge al empezar a anotar ideas en mi pequeño portátil. Su potencia de cálculo y capacidad de almacenamiento ampliamente superan las del *supercomputer* que la Universidad de Nueva York mostraba con orgullo a mediados de los 70, cuando fui autorizado a usarlo casi sin límite para estudiar propiedades de las aleaciones metálicas. Aquel lujo extraordinario es hoy objeto de consumo que ha infiltrado casi toda actividad profesional y académica y, de modo muy especial, los campos de la física. En consecuencia, en una revista para físicos, creo banal insistir en la importancia de los ordenadores. Aun así, hay ciertos aspectos relacionados que intuyo interesantes para muchos, sean estudiantes, enseñantes o profesionales de la física.

La 'computación' –término que tomo aquí referido al uso intensivo de ordenadores, esto es, en ese sentido amplio, ligeramente impropio, que ha venido a imponerse– ha tenido un papel determinante en el desarrollo de la física en las últimas décadas, y seguirá teniéndolo. En particular, los ordenadores son hoy indispensables para analizar científicamente esas series interminables de datos que generan las grandes instalaciones de aceleradores de partículas y observatorios astronómicos o las redes de estaciones para medidas atmosféricas. En estos casos, la computación complementa la física experimental (altas energías, astrofísica, meteorología, etc.) de modo esencial. Pero la computación es también crucial en física teórica donde, estudiando modelos algorítmicos de fenómenos físicos, permite resolver problemas que no son tratables analíticamente.

La computación permite entonces un interesante juego científico: Supongamos que disponemos de un buen modelo, detallado (digamos, microscópico), de la realidad observable que aspiramos a comprender. Mediante un programa adecuado, simulamos su comportamiento en la memoria de un ordenador, y medimos las magnitudes físicas relevantes. Se trata de un 'experimento numérico', pues puede proporcionar información parecida a la de un experimento, salvo que se refiere al modelo, no al sistema real que tenemos en el laboratorio. Es obvio que nuestro modelo supondrá una simplificación enorme de la realidad pero, si capta las características físicas esenciales del fenómeno en cuestión –de lo que habremos de convencernos, por ejemplo, estudiando variantes y comparando sus indicaciones con medidas de laboratorio–, se sigue una utilidad notable. Permitirá comprobar teorías, que han de ser capaces de describir el comportamiento relativamente sencillo del modelo antes que la compleja realidad. Además, dada la flexibilidad de estos *experimentos*, podremos a veces indagar e identificar los mecanismos o procesos físicos que ha de incorporar una buena teoría. No hay otro método, ni teórico ni experimental, que permita como éste escudriñar y relacionar las descripciones microscópica, mesoscópica, macroscópica, ... y cualesquiera intermedias que constituyen esa estructura jerárquica en capas con que se nos muestra la naturaleza.

Estas características de la computación ya se advierten en los ejemplos siguientes. Consideremos primero la 'agregación limitada por difusión' (DLA).¹ Este *fenómeno* se genera en un PC usando un programa que cabe en una página (de hecho, haría sonreír a un programador experimentado), pero conduce a física decididamente no-trivial. Dado un agrupamiento de N partículas, el programa manda la $N+1$ a un punto cualquiera de la superficie de una esfera que encierra al grupo, y deja luego que llegue a pegarse a cualquier parte de la superficie

de éste siguiendo un camino aleatorio. El carácter no-local de este crecimiento laplaciano genera complejos patrones que, aparte de servir para anunciar conferencias, parecen característicos de muchos fenómenos naturales condicionados por inestabilidades interfaciales e invariancias de escala. En todo caso, es notable que los problemas que plantea este sencillo programa siguen desafiando a físicos y matemáticos.²

Otro ejemplo conveniente es el celebrado 'autómata celular' que genera en el ordenador un comportamiento tipo Navier-Stokes.³ El ingrediente es un baile de partículas que, sin salirse de un plano, sigue una regla sencilla: Caracterizamos cada partícula por su posición —en un nudo de un hexágono regular— y velocidad \mathbf{v} ; a la voz de ya, cada una salta al nudo más próximo en dirección \mathbf{v} y, si los momentos en el nudo suman cero, giran 60°, de modo que o bien colisionan no-trivialmente o se cruzan. Repitiendo esta dinámica una y otra vez emerge un comportamiento, indistinguible del de un fluido real, semejante al descrito por las complejas ecuaciones hidrodinámicas de Navier-Stokes. Esto es, el modelo demuestra que la física esencial tras esta aproximación fenomenológica consiste en localidad (cada partícula es influida sólo por otras en su entorno inmediato), conservación (de momento y número de partículas —no es necesaria conservación de energía en este límite incompresible) y simetría (isotropía e invariancia por rotaciones) a nivel microscópico.

Está claro que la computación ha producido en los dos ejemplos anteriores importante información difícilmente obtenible por otros métodos. Ya señalaba Feynman que nuestras mentes no son capaces de entender las implicaciones de nuestras ecuaciones. Es más, parece difícilmente imaginable sin computación ese cúmulo de conocimientos llamado —para simplificar— 'ciencia de la complejidad', donde se demuestra cómo, y hasta qué punto, ingredientes sencillísimos cooperan para producir comportamientos ricos, bellos, complejos, científicamente interesantes.

Como último ejemplo, menciono el modelo de Bak-Sneppen.⁴ Se asocia una especie —representada mediante un número aleatorio— a cada uno de N nudos ligados formando un anillo, de modo que interacciona con sus dos vecinas más próximas, a la derecha y a la izquierda. Se busca el número mínimo, y se sustituye éste y sus dos vecinos por nuevos números aleatorios. Se itera y se estudia la distribución de números que así se va formando. El modelo, que quiere capturar las consecuencias de mutaciones aleatorias, muestra cambios súbitos compatibles con las ideas de Gould y otros cuestionando la creencia de que la dinámica darwiniana implica cambios graduales que, eventualmente, sólo pueden ser perturbados por catástrofes con causas externas. Como en los otros ejemplos, este modelo no puede ni llegar a formularse como un problema analítico; es inseparable del concepto de ordenador. En cualquier caso, como los otros, permite experimentar, comprobar teorías, descubrir mecanismos relevantes en un determinado fenómeno, ... y aventurar —con la precaución que convenga— la aplicación a sistemas reales de lo aprendido en el modelo simplificado.

Por supuesto, la 'legalidad' de este proceder científico tiene un severo límite. Es más fácil construir modelos y observar su comportamiento que aprender física de ello, aun cuando lleguemos a obtener bonitos patrones que mimeticen algo natural. En general, es necesario, como con otros métodos, comparar rigurosamente datos con resultados de laboratorio, e ir modificando la intuición para llegar a profundizar como nunca se haya hecho en ese problema, y obtener información en escalas espaciales y temporales no accesibles mediante otras técnicas, experimentales o teóricas.

La situación descrita en párrafos anteriores me hace dudar de la validez de ciertos tópicos relacionados con la computación o, más propiamente, con lo que ha dado en llamarse 'física computacional'. Me resisto a considerar a ésta como una herramienta especializada en investigación pareja con la microscopía electrónica, por ejemplo. Tampoco me parece del todo conveniente interpretar la

computación como una (tercera) rama metodológica de la física, al lado de la física experimental y de la física teórica. Aunque hay cierta justificación para ello, dado que la computación científica 'compite' de hecho con el experimento de laboratorio y con la teoría matemática como herramienta en la investigación en ciencia e ingeniería, me parece más importante resaltar que la física computacional, hoy, es más una disciplina enfocada hacia modelos algorítmicos que una herramienta a la que acudimos cuando el tratamiento analítico se hace difícil.

Imaginad que necesitamos resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para un sistema determinado. Se trata, *simplemente*, de un problema de ecuaciones diferenciales con condiciones de frontera que abordamos discretizando, esto es, adaptando la descripción continua dada a la estructura digital, esencialmente discontinua, del ordenador. La información que obtenemos puede ser muy importante pero es probable que, si nos vemos involucrados a menudo en este tipo de computación, acabemos teniendo la impresión de que estamos condenados a realizar estos procesos porque no somos lo suficientemente inteligentes. Por supuesto, la computación rutinaria no debe de sustituir a la indagación científica.

Me parece que, para que sean propias, la computación en ciencia y la física computacional han de involucrar necesariamente creatividad en un sentido científico, y no sólo desde un punto de vista técnico. En otro caso se convierten en algo así como la herramienta de un 'pobre hombre' para obtener resultados. Este pobre hombre depende crucialmente de que se vayan construyendo mayores y más rápidos ordenadores. La física computacional propiamente dicha se ha desarrollado a menudo en *laptops*. Además, es tan útil para teóricos como para experimentalistas y, es más, me atrevo a decir que su uso no puede considerarse exclusivo de expertos.

Quizás es interesante distinguir en este momento entre la *ciencia computacional* ('computational science') y la ciencia de los ordenadores o de la computación ('computer science'), que aquí ha dado en llamarse *informática*. Los físicos computacionales suelen ver la informática como una actividad que genera programas orientados hacia aplicaciones de poco valor científico, mientras que, desde la perspectiva de los científicos de la computación, los primeros parecen aferrados a herramientas y métodos que parecen neolíticos en su falta de sofisticación (de hecho, llaman 'software' o soporte lógico a sus programas). En definitiva, hay una barrera artificial entre las dos ciencias. En la práctica, muchos científicos se habrán sentido como bichos raros perturbadores al acercarse en busca de ayuda al centro de cálculo de su institución. Esta situación ha de cambiar; es necesario que los físicos aunemos esfuerzos con los informáticos y con los matemáticos en el desarrollo de herramientas computacionales, en la creación y mantenimiento de entornos científicos convenientes, y en la formación de una nueva generación de especialistas en ciencia computacional.

Los métodos desarrollados para explorar la naturaleza en el marco de la física computacional se han mostrado de enorme utilidad en otros dominios, particularmente, matemáticas, química, biología, ingeniería, medicina y sociología. Es más, sólo tiene sentido hablar de 'física computacional' puesto que, siendo sus aplicaciones variadísimas, en la vanguardia de prácticamente todos los campos científicos, siempre involucran métodos similares. Para la curiosidad de algunos lectores, mencionaré rápidamente que la física computacional tiene en la actualidad un fuerte impacto en física de la materia condensada, ciencia de los materiales, física de plasmas, hidrodinámica y turbulencia, astronomía y ciencias de la tierra, incluso en relación con desastres, cambios climáticos y otros fenómenos atmosféricos y oceánicos, y en matemáticas aplicadas, biología, química cuántica, diseño de fármacos y ciencia molecular, industria nuclear, física de partículas, tecnología de la información, evolución, ecología, dinámica de poblaciones, y finanzas, por

ejemplo. En consecuencia, licenciados y jóvenes investigadores con buena formación en física computacional son apreciados en industrias, laboratorios y negocios, y pueden desempeñar una labor importante en la transferencia de conocimientos desde el mundo académico hacia las actividades productivas más aplicadas.

Si esto es así y la computación está, en cierto sentido, a la par de la teoría y del experimento, hay que concluir la urgencia en formar jóvenes en física computacional. En efecto, además del vehículo más usado en investigación, los ordenadores son hoy, en este contexto, generadores de empleo para nuestros licenciados y un excelente adaptador de éstos al cambiante mercado de trabajo.

Algunos de nuestros planes de estudio ya incluyen asignaturas de física computacional,⁵ y los nuevos programas de doctorado permiten a veces esa inclinación. Cito como ejemplo el programa *FisyMat* puesto en marcha por los Departamentos de Análisis Matemático, Matemática aplicada, Electromagnetismo y Física de la materia de la Universidad de Granada,⁶ que se propone incluir un específico título 'máster'. Forma parte de este programa el *Granada Seminar on Computational Physics*,⁷ una reunión bianual de interesados en física computacional que aprovecha toda su potencia pedagógica para servir de estímulo a estudiantes y jóvenes investigadores. También conozco en este sentido interesantes iniciativas concretas en Suecia, Singapur, República Checa y EEUU, y me parecen un ejemplo a seguir los programas máster interdisciplinares, generalmente con fuerte contenido computacional, que están impulsando algunas instituciones estadounidenses.⁸

El papel extraordinario que ya tiene la computación en física, y el prometedor futuro que esta situación permite adivinar, ha propiciado la creación de asociaciones internacionales. Entre ellas debo citar la Comisión de Física Computacional (C20) de la Unión Internacional de Física Pura y Aplicada (IUPAP)⁹ y el Grupo de Física Computacional (CPG) de la Sociedad Europea de Física (EPS),¹⁰ que —en colaboración con el CECAM; véase abajo— acaba de crear el 'premio Berni Alder' para contribuciones en el campo. Aunque es posible que pocos investigadores se cataloguen todavía como físicos computacionales en primera opción, es notable la actividad de estas asociaciones y la nutrida asistencia de investigadores de todas las edades en congresos y otras reuniones que se amparan bajo tal denominación, confirmando así mi sugerencia arriba de que muchos, quizás todos, nos consideramos —aunque no expertos— en mayor o menor medida miembros del club.

De hecho, ya existen importantes instalaciones en los EEUU y en Europa para el desarrollo específico de la física computacional y sus aplicaciones. Citaré al respecto el *John von Neumann Institute for Computing* (NIC), fundado en 1998 fruto de la colaboración entre el Centro de Investigación de Jülich (FZJ), la Fundación Alemana Electrón-Sincrotrón (DESY) y el Instituto Central para Matemáticas Aplicadas (ZAM); participan en el NIC cerca de un centenar de centros de investigación alemanes con unos pocos de Canadá, EEUU, Austria y Suiza.¹¹ La etiqueta más europea de física computacional quizás corresponda en este momento al Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular (CECAM),¹² actualmente en la Escuela Normal Superior de Lyon, fundado en París en 1969 como consorcio de las agencias nacionales para fondos de investigación científica de Bélgica, Francia, Grecia, Holanda, Italia, Reino Unido y Suiza.¹³ España no ha decidido todavía su participación a este importante centro; afortunadamente, como consecuencia de iniciativas personales, la mayoría de los grupos españoles activos en física computacional colaboran con el CECAM y con otros grupos europeos a través de la red SIMU (*Challenges in Molecular Simulations: Bridging the Length and Time-Scale Gap*) subvencionada por la Fundación Europea para la Ciencia (ESF).¹⁴

Como resalta James S. Langer, actual presidente de la Sociedad Americana de

Física (APS), en su informe a las agencias estadounidenses DOE y NSF:¹⁵ *The science of computing is moving at extraordinary speed these days. It is essential that some part of the physics community keep up with these developments, not just for our own sake, but also because the computer scientists and mathematicians need these interactions as much as we do. I am not sure that the physics community is moving in this directions as enthusiastically as it should.* Me uno al análisis y a la plegaria. Los EEUU acaban de desarrollar importantes iniciativas en este sentido como, por ejemplo, la *National Partnership for Advanced Computational Infrastructure* (NPACI) auspiciada por su Fundación Nacional para la Ciencia (NSF).¹⁶ Es obvio que Europa ha de hacer esfuerzos semejantes y, por lo que a nosotros atañe más de cerca, España ha de sumarse decididamente a ellos. Es más, sería razonable que este país, con un crónico pobre esfuerzo investigador y un presupuesto que, digan lo que digan, todos venimos sintiendo a la baja en los últimos años, incentivase prioritariamente áreas que, como la ciencia computacional, no necesitan de inversiones descomunales y, dado su fuerte carácter multidisciplinar, son capaces de *tirar* significativamente de la investigación en todos los campos. Así sea.

¹ T.A. Witten and L.M. Sander, *Phys.Rev.Lett.* **47**, 1400 (1981)

² J.F. Fernández, in *2nd Granada Lectures in Computational Physics*, P.L. Garrido and J. Marro eds., World Scientific, Singapore 1993.

³ U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau, *Phys.Rev.Lett.* **56**, 1505 (1986)

⁴ P. Bak, *How Nature Works*, Springer--Verlag, New York 1996.

⁵ Puede verse un ejemplo concreto de programa experimental para la asignatura *física computacional* de la Licenciatura de Física en <http://ergodic.ugr.es/cphys/>

⁶ <http://www.ugr.es/~docto/> y <http://ergodic.ugr.es/efm/>

⁷ <http://ergodic.ugr.es/cp/>

⁸ “Professional Master's Degrees Promise Quicker Entry into Industry Jobs”, *Physics Today*, p.54, June 1999 y “Developing a Computer-Rich Physics Curriculum at a Liberal-Arts College”, *Computers in Physics* **11**, 437 (1997)

⁹ <http://www.iupap.org/>

¹⁰ <http://www.phys.ntnu.no/~alexh/CPG/>

¹¹ <http://fz-juelich.de/nic/>

¹² <http://www.cecarn.fr/>

¹³ Participan actualmente en el consorcio CECAM las agencias: Fonds National de la Recherche Scientifique (Bélgica), Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek}, Centre National de la Recherche Scientifique y Commissariat à l'Energie Atomique (Francia), Consiglio Nazionale delle Ricerche e Istituto Nazionale di Fisica della Materia (Italia), Engineering and Physical Sciences Research Council (Reino Unido), Foundation for Research and Technology (Grecia) y Fonds National Suisse.

¹⁴ <http://simu.ulb.ac.be/>

¹⁵ <http://www.er.doe.gov/ssi/LangerReport.pdf> contiene el informe en el *US National Workshop on Advanced Scientific Computing*.

¹⁶ <http://www.npaci.edu/>