Una publicación de LUFAC

Octubre 2019 - Número 01 - Año 1
ISSN: En trámite

México Siglo XXI I+T

MÉXICO SIGLO XXI INVESTIGACIÓN & TECNOLOGÍA

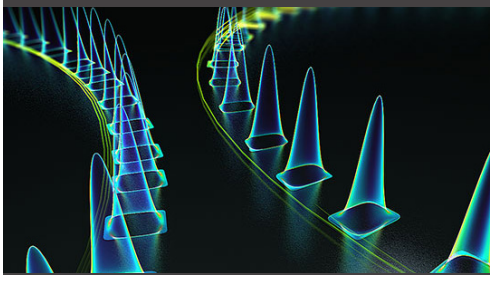
Revista de Divulgación

INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Los hoyos negros bajo los reflectores

Tecnologías móviles e Inteligencia Artificial para pruebas neuro-psicológicas en adultos mayores

El Misterio del Solitón



LUFAC®

23 AÑOS AL SERVICIO DE LA EDUCACIÓN Y LA CIENCIA

SERVICIOS QUE OFRECEMOS

INVESTIGANDO
DESARROLLANDO
INNOVANDO

Directorio

Lucy Benítez
Directora

Lester Alfonso
Editor Responsable

Fernando Almaraz
Coeditor

Consejo Editorial

Amilcar Meneses Viveros

César Augusto Terrero Escalante

José María Zamora

Contacto

Mail: *revistasiglo21@lufac.com*

¿Y NUESTROS JÓVENES, DÓNDE ESTÁN?

Hace casi setenta años que la investigación comenzó a despegar en nuestro país, cuando algunos jóvenes que habían estudiado en su mayoría el doctorado en el extranjero, regresaban animosos y decididos a continuar proyectos que traían de los diferentes sitios en los que habían trabajado y estudiado. En 1984 había 1,396 investigadores registrados en el Sistema Nacional de Investigadores (SNI). Hoy, 35 años después, el SNI tiene registrados 30,548 investigadores, según el último registro del CONACYT. Un crecimiento de 832 investigadores por año en promedio. La pregunta es, ¿por qué no hay más jóvenes interesados por abrazar la carrera científica? La Ciencia es un elemento central de independencia económica, pero sobre todo, al igual que la música, la pintura o la literatura, la ciencia forma parte de la cultura de los pueblos. Además, la formación científica ofrece una manera diferente de pensar, que obliga en cierta forma a los individuos a rechazar aquello que no se fundamenta en hechos o razonamientos claros; genera individuos mucho más difíciles de engañar y de manejar, los vuelve no sólo más cultos, sino también más dignos y más libres. Existen diferentes programas que van desde conferencias para niños, las Olimpiadas de la Ciencia, la Semana y el Verano de la Investigación Científica, hasta la participación de la Academia Mexicana de Ciencias en distintos programas de difusión. Pero de nada sirven estos esfuerzos si nuestra visión como ciudadanos de este país acerca de lo importante que es seguir con el crecimiento académico no cambia. La gran mayoría de nuestros jóvenes piensan, en el mejor de los casos, que terminar la Universidad es suficiente. Incluso muchos la terminan, pero no realizan nunca sus trámites de titulación. La urgencia de integrarse al mercado laboral se ve incrementada por las necesidades familiares. No se dan cuenta que de esforzarse unos años más, tendrán mucho mejores oportunidades no sólo para ellos, sino para sus familias. Reconocer que terminar una licenciatura es el preámbulo de la maestría y después del doctorado, es el cambio cultural que se requiere para que las próximas generaciones sepan que ese es el camino. No podemos seguir pensando que ser un país lleno de técnicos nos dará el crecimiento. Países como Corea del Sur, Noruega, Finlandia e Israel han logrado un gran crecimiento apostando a la generación de más científicos. Cambiemos desde nuestros hogares esta cultura, motivemos a nuestros jóvenes a continuar creciendo, a no dejarse vencer, a seguir adelante. Las historias de personas exitosas en muchas áreas que no se dejaron vencer, que no tuvieron todos los elementos a la mano pero que con esfuerzo alcanzaron la cima se pueden multiplicar. Podemos ser un mejor país, pero es necesario que nos lo propongamos: Jóvenes, Maestros, Padres, Gobierno, Empresarios. Todos por un mismo fin.

Revista México Siglo XXI Investigación y Técnologia, Año 1, No.1. Octubre 2019, es una publicación cuatrimestral,editada por LUFAC Computación S.A de C.V., Savona #30, Colonia Fraccionamiento Residencial Acoxpa, Delegación Tlalpan, C.P. 14300, Ciudad de México, Tel. 56785051
correo electronico revistasiglo21@lufac.com
Editor responsable Lester Alfonso Díaz. ISSN: solicitud en tramite.
Éste número se termino de imprimir el día 1º de mes de octubre de 2019, con un tiraje de 15,000 ejemplares.

El contenido de los árticulos es responsabilidad de los autores y no refleja el punto de vista de los árbitros, del Editor o de LUFAC Computación.
Se autoriza la reproducción de los artículos (no así de las imágenes) con la condición de citar la fuente y se respeten los derechos de autor.
Imagen(es) usada(s) en conformidad con la licencia de freepick.

Revista México Siglo XXI
Investigación y Tecnología
Octubre 2019

Carta del Director ..... pag 1

Sumario ..... pag 2 -3

En este número ..... pag 4 -5

El Futuro a Comenzado

Artículos ..... pag 8 -23

Los hoyos negros bajo los reflectores **pag 6 -9**

Tecnologías móviles e inteligencia artificial para pruebas neuro-psicologas en adultos mayores **pag 10 -12**

El misterio del solitón **pag 14 -19**

Inteligencia Artificial: El desafio computacional para el futuro **pag 20 -22**

Dentro de LUFAC ..... pag 23 -25

Medioscopio ..... pag 26 -27

Tendencias ..... pag 28 -29

Notas del lector ..... pag 30 -31

El Futuro ha Comenzado

Bienvenidos al primer número de nuestra revista. México Siglo XXI: Tecnología e Investigación, nace como un proyecto de LUFAC Computación SA de CV, cuyo objetivo es promover los avances en investigación científica y tecnológica en México y en el mundo, y promover la reflexión. En nuestro mundo globalizado y altamente tecnológico, la ciencia y la tecnología están cada vez más presentes en cada faceta de la vida cotidiana, y durante los últimos veinte años han aparecido un sinnúmero de tecnologías disruptivas que han destinado a la obsolescencia muchos de los mecanismos anteriores. Es por eso que resulta fascinante reportar avances tecnológicos y científicos en esta etapa revolucionaria.

El núcleo de este número son cuatro artículos de divulgación. El primero, de estos artículos "Los hoyos negros bajo los reflectores", es una colaboración del Dr. César Augusto Terrero Escalante, profesor investigador de la Universidad de Colima. El artículo es de actualidad, porque la primera fotografía de un hoyo negro supermasivo (equivalente a 6500 millones de veces la masa del sol) fue noticia de primera plana en los medios de comunicación en abril del presente año.

Los investigadores Erika Hernández Rubio y Amílcar Meneses del CINVESTAV, nos traen la colaboración titulada: "Tecnologías móviles e inteligencia artificial para pruebas neuropsicológicas en adultos mayores", donde se reportan avances logrados en pruebas clínicas utilizando herramientas de inteligencia artificial.

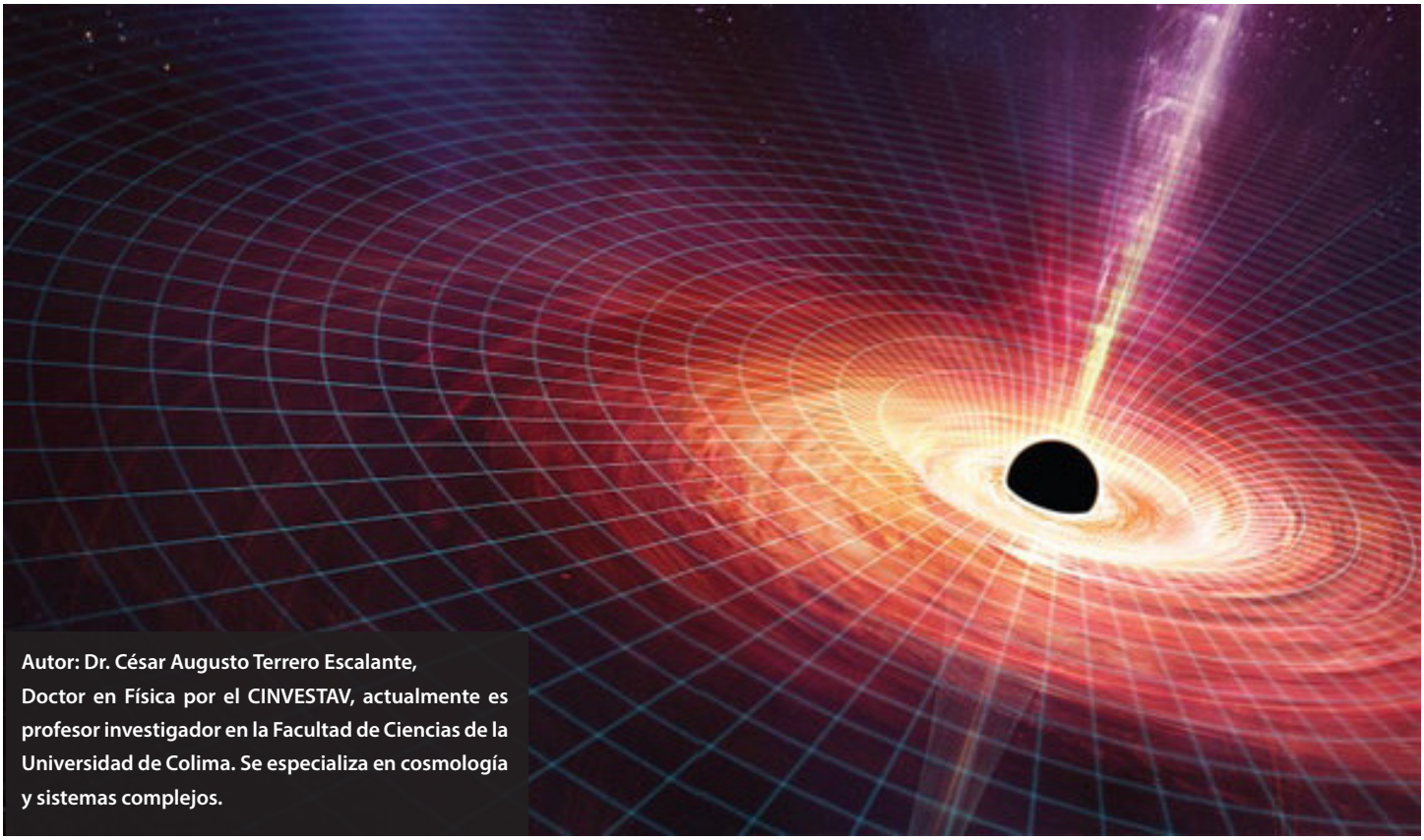
El tercer artículo es "El misterio del solitón", del Dr. Léster Augusto Alfonso Díaz de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México. Esta contribución es una excursión a la historia de las ondas solitarias, un tipo de ondas con propiedades de partículas, que han encontrado un sinnúmero de aplicaciones en muchas ramas de la física, la hidrodinámica, la biología y la transmisión de la información.

Por último, el Maestro José María Zamora de la empresa LUFAC Computación, nos presenta su contribución "HPC e Inteligencia artificial: el desafío del futuro", con una revisión de la explosión tecnológica en este campo, y el crecimiento exponencial en el desarrollo de aplicaciones en esta área.

También tenemos noticias de avances recientes en ciencia y tecnología en nuestra sección Medioscopio. En la sección Dentro de LUFAC, se reportan los resultados obtenidos por el grupo de Investigaciòn y Desarrollo (I&D) de LUFAC Computación con el programa NAMD (Not (just) Another Molecular Dynamics program) en diferentes arquitecturas, y la aplicación de técnicas de inteligencia artificial en la modelación de la estructura de proteínas.

Por último, el artículo "Lo que vendrá", en la sección Tendencias, una meditación filosófica presentada por el Dr. Léster Augusto Alfonso Díaz: ¿Podemos predecir nuestro futuro?.

LOS HOYOS NEGROS BAJO LOS REFLECTORES



Autor: Dr. César Augusto Terrero Escalante, Doctor en Física por el CINVESTAV, actualmente es profesor investigador en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Colima. Se especializa en cosmología y sistemas complejos.

En los últimos años, prácticamente cada mes, aparece en los medios de información una noticia relacionada con hoyos negros. Aunque la historia de estos exóticos objetos comenzó hace alrededor de dos siglos y medio, ha sido el desarrollo reciente de la tecnología el que nos ha permitido observarlos. Esta última frase resulta paradójica, puesto que un hoyo negro se puede definir como un cuerpo astronómico capaz de ejercer una atracción gravitacional tan intensa que ni siquiera la luz puede escapar de su entorno[1].

Hasta donde conocemos, el primero en predecir la existencia de este tipo de objetos fue el reverendo inglés John Michell en 1783. Basándose en la hipótesis newtoniana del carácter corpuscular de los componentes de los rayos luminosos, Michell determinó las características que debía tener un cuerpo para que su velocidad de escape fuese mayor que la de la luz. Sabemos que si, al lanzar una pelota, queremos que caiga lo más lejos posible, debemos lanzar lo más fuerte que podamos para que de nuestra mano salga con la mayor velocidad posible.

Los cohetes que portan los satélites son lanzados con una velocidad inicial tan grande que después de ascender no regresan acto seguido a la superficie terrestre. No obstante, estos cohetes (y los satélites) siguen sujetos a la fuerza de atracción ejercida por la Tierra y es por eso que se quedan girando alrededor de nuestro planeta. La Luna misma es un satélite, así que aunque para llegar a ella hay que impulsar a los cohetes con una velocidad extraordinariamente alta, esta tampoco es suficiente para librarse del campo gravitacional terrestre. Si seguimos incrementando esa velocidad hasta ser capaces de recorrer aproximadamente 11 kilómetros en un segundo, no sólo no regresaríamos a la superficie, sino que podríamos despedirnos para siempre del planeta azul para adentrarnos en la inmensidad cósmica. A esa velocidad se le conoce como velocidad de escape.

1 Para poder ver un objeto nos debe llegar luz emitida o reflejada por el objeto.

Todos los objetos celestiales tienen una velocidad de escape que depende principalmente de su masa y de su radio (si suponemos que esa masa está concentrada en una esfera).
Al resolver el problema que se había propuesto, Michell encontró que para una estrella que tuviese la misma densidad del Sol, pero 500 veces su tamaño, la velocidad de escape excedería el valor de la velocidad de la luz y de manera espectacular concluyó que tal estrella sería invisible, aunque su presencia sería detectable por su atracción sobre los cuerpos astronómicos vecinos a ella.

Figura 1: Karl Schwarzschid (1873-1916)

Cuando John Michell concibió la idea sobre los hoyos negros no existían las condiciones para que fuese entendido y no tuvo repercusión alguna por mucho tiempo. Además, estaba basada en la suposición de que los corpúsculos luminosos tenían masa y, por lo tanto, al no poder escapar seguían una trayectoria parabólica, como sucede con todos los proyectiles de acuerdo con la Ley de Atracción Universal de Newton. Esto contradecía muchos otros resultados verificados experimentalmente, de acuerdo a los cuales los rayos de luz siempre se mueven en línea recta, o sea, la trayectoria más corta en el espacio euclidiano[2] en que vivimos.

Sin embargo, en 1915 Einstein, en su Teoría General de la Relatividad, mostró que la acción gravitatoria es en realidad el resultado de la deformación del espaciotiempo alrededor de los cuerpos masivos, por lo que en presencia de objetos con masas suficientemente grandes como la de nuestro Sol la luz realmente viaja a lo largo de curvas que caracterizan las trayectorias más cortas en geometrías que no son euclidianas[3].
En enero de 1916, la primera solución exacta (sin aproximaciones) que se obtuvo en el marco de esta teoría fue la conocida como geometría de Schwarzschild en honor al físico alemán que derivó este resultado. Lo desconcertante de esta solución fue que predecía la existencia de un límite en el espacio, con la propiedad de que, al cruzar hacia adentro de la esfera que este límite define (llamada horizonte de eventos), las trayectorias de los rayos luminosos se curvan de manera tal que nunca vuelven a salir. Al caer dentro del horizonte de eventos ningún objeto vuelve a ser visible, o sea, las mismas propiedades que describió Michell, pero con una base teórica sólida. Aún más, en el centro de la esfera constituida por el horizonte de eventos, la solución de Schwarzschild presenta una singularidad, o sea, un punto de espaciotiempo donde la teoría de Einstein no es válida. No es de extrañar, por lo tanto, que este no aceptara, por mucho tiempo, la existencia de tales objetos en la Naturaleza. Fue con el trabajo de Robert Oppenheimer y colaboradores que se mostró que los hoyos negros podía ser el estado final en el colapso gravitacional de estrellas muy masivas, lo cual convirtió la solución teórica en un objeto astronómico que valía la pena buscar. En 1968, el físico estadounidense, John Wheeler acuñó el término, ahora popular, de hoyo negro, aunque es conveniente precisar que más que una ventana en el espacio interestelar, los hoyos negros son como bolas oscuras dispersadas en el cuarto (mayoritariamente) oscuro que es nuestro Universo.
¿Cómo se puede buscar un objeto que es, en esencia, invisible? Depende de su masa. Se han detectado candidatos a hoyos negros en el centro de casi todas las galaxias. Suelen ser gigantescos. Por ejemplo, cerca de la estrella Sagitario A, no muy lejos del centro de la Vía Lactea, parece existir uno con una masa que es alrededor de seis mil millones de veces la masa del Sol. Tales gigantes son detectables, como lo predijo Michell, por el efecto que su atracción gravitacional tiene sobre las trayectorias de las estrellas cercanas. Esto se puede observar con los instrumentos astronómicos más convencionales, los telescopios ópticos. Otros hoyos negros, de mucha menor masa y que rotan sobre un eje propio, en ocasiones forman parejas con estrellas pequeñas y poco a poco van absorbiendo las partículas que son producidas continuamente por la estrella. De esta manera se va conformando un disco de polvo y gas alrededor del "ecuador" del hoyo negro y la bola oscura queda bordeada por un cinturón brillante formado por las partículas que irradian ondas electromagnéticas a medida que caen dentro del horizonte de eventos.
A este cinturón se le llama disco de acreción y puede ser observado, a distancias donde la luz visible resulta demasiado tenue, usando medios más avanzados como los telescopios de rayos x y rayos gamma, instrumentos que deben estar colocados a bordo de satélites para evitar la dispersión de estos rayos por la atmósfera terrestre. Vale la pena señalar que existen otros mecanismos de formación de discos de acreción, por lo que también existen hoyos negros supermasivos con estos cinturones brillantes.

2 O sea, un espacio cuya geometría es la descrita por los axiomas de Euclides, por ejemplo, donde dos rectas paralelas jamás se cortan.
3 Por ejemplo, sobre la superficie de una esfera el camino más corto entre cualquier par de puntos es un arco de cículo.

Durante décadas se fue acumulando evidencia sobre la presencia de hoyos negros a lo largo y ancho del Universo, pero existía una dificultad infranqueable para poder asegurar su existencia. Las señales que pueden medir los instrumentos que hasta ahora se usaban no son exclusivas de los hoyos negros, sino que pueden ser producidas por objetos que, a pesar de ser extraordinariamente compactos, no necesariamente alcanzan la categoría de hoyos negros, por ejemplo, las estrellas de neutrones.

Una señal definitiva sería la detección de un horizonte de eventos, pero por su propia definición esto parecía imposible. Afortunadamente, el avance científico-tecnológico durante los últimos treinta años nos ha demostrado que debemos ser cautos al juzgar qué es imposible. Con el incremento significativo del poder de procesamiento de las computadoras y el trabajo colectivo de físicos y matemáticos ha sido posible elaborar programas que describen la interacción de hoyos negros con otros objetos astronómicos. Posiblemente el hallazgo más importante de estos estudios es que el resultado de esta interacción es generalmente una colisión, al final de la cual se crea un hoyo negro diferente al original. La diferencia radica en un horizonte de eventos generalmente mayor, una modificación de los límites de la bola oscura como resultado de la colisión, lo cual no es otra cosa que una alteración del espaciotiempo en la vecindad del hoyo negro. Una de las predicciones más importantes de la teoría gravitacional de Einstein es que después de una alteración local del espaciotiempo el resto del Universo no se reacomoda instantáneamente, sino que la información sobre la alteración se transmite en ondas que viajan a la velocidad de la luz. La colisión de un hoyo negro con diferentes objetos astronómicos produce diferentes alteraciones del espaciotiempo, o sea, ondas gravitacionales con distintos patrones de propagación. Así, los estudios teóricos en las computadoras sobre las colisiones en que participan hoyos negros permitieron crear un catálogo de patrones de ondas gravitacionales, como huellas dactilares que permiten distinguir un caso de otro. Otro resultado importante de estas investigaciones fue obtener una idea gráfica de cómo realmente deben verse los hoyos negros. Al resolver mediante aproximaciones numéricas las ecuaciones de Einstein para hoyos negros rotantes con disco de acreción emergió una imagen espectacular: si estamos de un lado de la bola oscura tal que veamos el disco de acreción como un ancho cinturón brillante en su ecuador, puesto que los rayos luminosos se curvan bajo la acción gravitacional del hoyo negro, también nos llegará luz desde la parte del disco de acreción que está detrás de la bola oscura, pero ahora distribuida por todo el perfil del horizonte de eventos. Esa fue la imagen que se usó para el hoyo negro Gargantúa en la película Interestelar estrenada en el 2014.

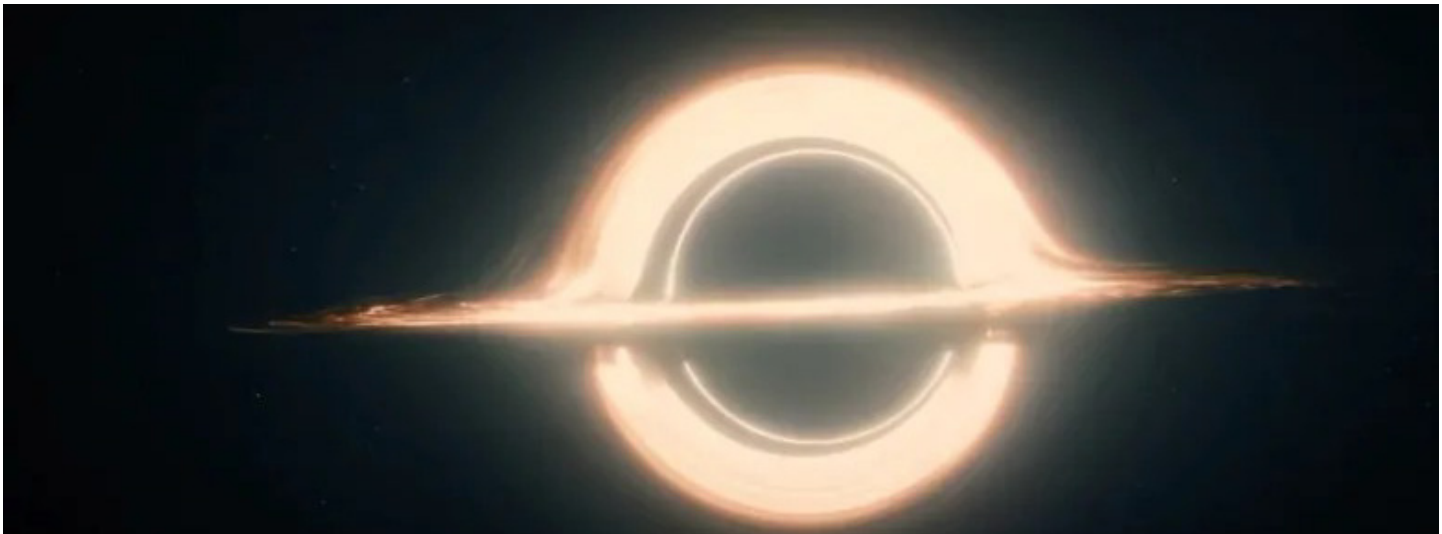


Figura 2: Gargantúa es la versión artística de la solución numérica de las ecuaciones de Einstein para un hoyo negro supermasivo (tomado de la película Interestelar de Christopher Nolan, presentada por Paramount Pictures and Warner Bros. Pictures en asociación con Legendary Pictures.)

Otras huellas dactilares son producidas por otros tipos de alteraciones del espaciotiempo, como por ejemplo, por la explosión de supernovas. Por la importancia que esta predicción tiene para la Teoría General de la Relatividad, desde la mitad del siglo pasado comenzó a realizarse un esfuerzo arduo para detectar ondas gravitacionales.

La dificultad fundamental para esta empresa es que, aunque los eventos que producen ondas gravitacionales considerables son cataclísmicos, ocurren a distancias tan descomunalmente grandes que a nosotros nos llegan unas fluctuaciones prácticamente imperceptibles del espaciotiempo. Para tener una mejor idea, recordemos que nuestro Sol es capaz de emitir llamaradas que pueden llegar a tener un par de decenas de veces el tamaño del planeta Tierra, sin embargo, debido a la gran distancia entre ambos cuerpos, el efecto de estas explosiones es, a lo sumo, un aumento en la intesidad de las auroras boreales y algo de interferencia en las telecomunicaciones.

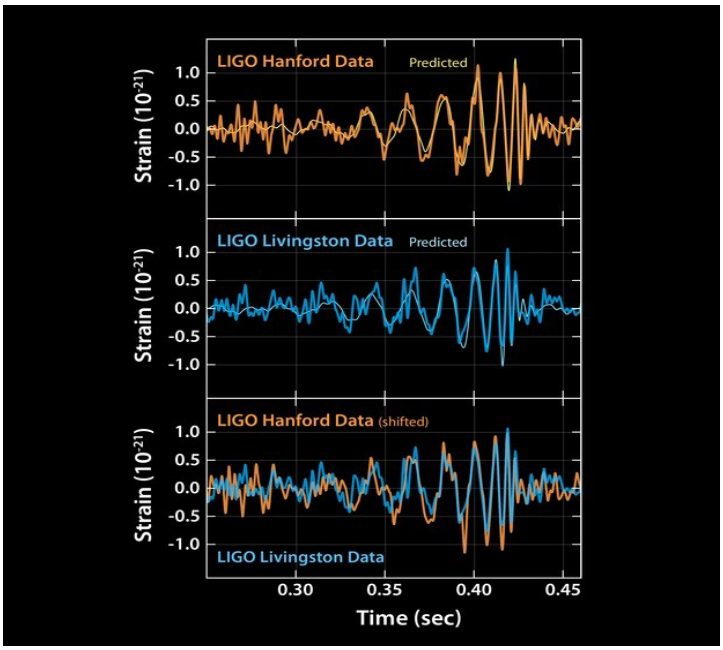


Figura 3:Señal de las ondas gravitacionales registradas en febrero del 2016 por los dos laboratorios que conforman LIGO, ubicados en Livingston y Hanford en EEUU (www.ligo.caltech.edu/image/ligo20160211a)

Detectar el paso por la Tierra de una onda gravitacional causada por eventos ocurridos fuera de la Vía Láctea usualmente implica ser capaces de medir cambios de distancias mucho menores que el radio del núcleo de un átomo de hidrógeno. Para esto se creó LIGO, las siglas en inglés de Observatorio Geofísico de Interferometría de Láser, diseñado para medir tal cambio de distancia entre espejos separados por cuatro kilómetros. Es difícil enfatizar suficientemente la proeza que implica una medición tan precisa. En otras palabras, los instrumentos de LIGO sería capaces de detectar que la distancia entre el Sol y la estrella más cercana (distante unos 4 años luz) se modificase por el grosor de un cabello humano. Como resultado de muchos años de esfuerzo teórico y experimental, en septiembre del año 2016, este portento tecnológico acaparó la atención de la comunidad científica al captar por primera vez una onda gravitacional. Al comparar con el banco de patrones, se identificó el evento que la produjo como la colisión de dos hoyos negros gigantescos ubicados a mil millones de años luz de nuestro planeta.

Por primera se tuvo una señal directa de la existencia de hoyos negros. Hasta el presente se han detectado otras diez ondas gravitacionales, todas excepto una[4], producidas por colisiones cataclísmicas entre hoyos negros. Nuestra visión del Universo ha cambiado radicalmente gracias a lo que ahora se conoce como astronomía de ondas gravitacionales. Pudimos detectar las ondas gravitacionales causadas por drásticas alteraciones del horizonte de eventos, ¿pero podemos ver un hoyo negro? Digamos, ¿podríamos hacer una fotografía de un hoyo negro bordeado por un disco de acreción, tal como se ve Gargantúa en la película Interestelar? La dificultad en este caso es que, por muy grandes que sean los hoyos negros supermasivos, a través de las enormes distancias que nos separan (por ejemplo, el hoyo negro cerca de Sagitario A se encuentra a unos 25000 años luz de la Tierra) la luz en el rango visible se atenúa tanto por su dispersión que es prácticamente imposible percibirla con un telescopio óptico astronómico.

Figura 4: Imagen del hoyo negro en M87 tomada por el EHT (eventhorizontelescope.org)

Con uno, pero no con ocho que actúen como uno. Recordemos una vez más que para ver un objeto debemos captar la luz que emite o se refleja en él. Mientras mayor sea el área con la cual captemos esa luz, más distantes podrán estar los objetos que podremos ver. La construcción de telescopios con áreas de captura cada vez mayores involucra dificultades técnicas de todo tipo. Es por eso que se diseñó el Telescopio de Horizontes de Eventos (EHT, sus siglas en inglés) que, en realidad no es un telescopio, sino una red de ocho radio telescopios terrestres. El reto tecnológico en este caso fue la creación de hardware y software que sincronizara todos estos telescopios para que funcionasen como del tamaño de la Tierra entera. De esta manera, hace unos pocos meses se pudo obtener la primera fotografía de un hoyo negro, una colosal bola oscura rodeada por un disco de acreción en el centro de la galaxia espiral Messier 87, a unos 55 millones de años luz de la Tierra, una imagen con una gran concordancia con la que arrojó la solución de las ecuaciones de Einstein.

Los hoyos negros han entrado a formar parte indiscutible de la descripción de nuestro Universo y ahora que están bajo los reflectores quién sabe cuántos misterios nos develarán, entre otros, enigmas del mundo cuántico (pero esa es ya otra historia).

4 Una de las detecciones correspondió a la colisión entre estrellas de neutrones.

Autores: Erika Hernández-Rubio*
Amilcar Meneses Viveros**
*Instituto Politécnico Nacional, SEPI-ESCOM, Ciudad de México, México.
**Departamento de Computación, Cinvestav-IPN, Ciudad de México, México.

TECNOLOGIAS MOVILES E INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA PRUEBAS NEURO-PSICOLOGICAS EN ADULTOS MAYORES

Un tema fundamental en el área de computación sustentable es el uso de la tecnología para abordar problemas de salud pública. En este sentido, el crecimiento que han tenido las tecnologías aplicadas a eSalud lo confirman. Actualmente hay un gran interés en explotar algunas tendencias de computación como Inteligencia Artificial, BigData y Computación de Alto Rendimiento para ayudar a las tareas de computación sustentable, sin embargo hay mas tópicos de tecnologías de la información y comunicaciones que pueden aprovecharse. En este artículo se presenta cómo es posible usar la tecnología para desarrollar herramientas de tipo eSalud orientadas a los adultos mayores y se presenta cómo la Interacción Humano-Computadora (IHC), la Computación Móvil (CM), la Inteligencia Artificial (IA) y la Computación de Paralela (CP) se combinan para ello.

Los adultos mayores representan un porcentaje de la población en México, que es vulnerable con respecto al acceso a servicios de salud. Actualmente solo el 56% de la población mayor de 65 años tiene garantizado el servicio de salud. En los últimos años se puede identificar una brecha de servicios salud entre el incremento de las instituciones, médicos y servicios que se proporcionan a los adultos mayores [1][2][3][4][5]. En 2018 el IMSS reportó que se incremento en un 48% el porcentaje de pacientes de la tercera edad a los que atiende[11].

Aunque México se ha convertido en un país urbano (según datos del INEGI, el 75% de la población vive en ciudades de más de 500 mil habitantes [9][10]) y los principales hospitales de especialidades se encuentran en estas ciudades, aun falta tener cobertura en áreas rurales y poblaciones de menos de 500 mil habitantes. Por un lado, el uso de la eSalud puede ayudar a especialistas a aumentar la cobertura de atención de pacientes. Por otro lado , la tecnología móvil apoyaría a que los adultos mayores que tiene dificultades para trasladarse de lugar no se desplacen a las instituciones y que los especialistas puedan atenderlos o darles seguimiento desde su casa [7][8].

Los deterioros naturales que se presentan en los adultos mayores (auditivos, visuales, memoria y motrices), inciden en la vida cotidiana de este grupo y requieren de atención medica para su prevención, tratamiento y seguimiento.

Para la detección, tratamiento, y seguimiento del deterioro mental por ejemplo, se realizan pruebas de neuro-psicología, como son: Neuropsy, Weis y Luria. La mayoría de estas pruebas toman como base la batería de Pruebas de Luria desarrolladas a inicios del siglo XIX. Desde entonces se han ido perfeccionando y colocándoles valores cuantitativos para obtener elementos que determinan distintos deterioros mentales en los pacientes [6].

La aplicación tradicional de las pruebas neuro-psicológicas implica que el especialista vaya guiando al paciente y al mismo tiempo realice sus anotaciones de la evaluación. Este proceso puede automatizarse a través de aplicaciones donde se pueda realizar la prueba y guarden el historial de resultados de los pacientes para que posteriormente el especialista haga sus evaluaciones.

La Figura 1 presenta la relación entre IHC, CM, IA y CP para desarrollar aplicaciones de eSalud que permita a adultos mayores realizar pruebas neuro-psicológicas a distancia con un seguimiento por parte de especialistas. La IHC permite que las aplicaciones para los adultos mayores y los especialistas sean intuitivas y fáciles de usar. La CM permite que las aplicaciones se ejecuten en cualquier lugar y en cualquier momento. La IA apoya en la evaluación de algunas pruebas neuro-psicológicas. Finalmente la CP permite la ejecución de las tareas de IA de forma rápida y eficaz.

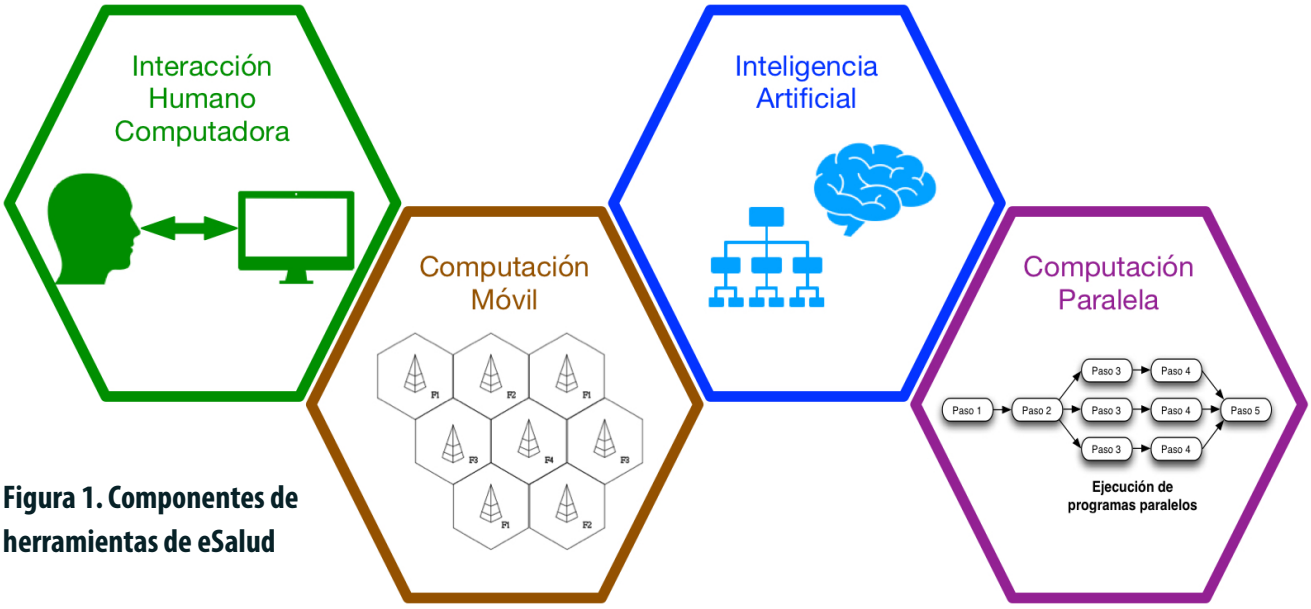


Figura 1. Componentes de herramientas de eSalud

Las pruebas neuro-psicológicas puede pueden ejecutarse en computadoras de escritorio, laptops, tabletas, incluso televisiones inteligentes. Las tabletas se presentan como el dispositivo móvil ideal para los usuarios, debido a que son populares, cada vez es mas fácil tener acceso a servicios de internet y cuentas diversas modalidades de interacción que permiten que la interacción con sus aplicaciones sea fácil. Las aplicaciones para tabletas se llaman aplicaciones móviles (debido a que las tabletas se consideran en el conjunto de dispositivos móviles, al igual que los teléfonos inteligentes y algunas cámaras fotográficas, por mencionar algunos). Las aplicaciones móviles requieren de un desarrollo orientado al usuario mayor. Como los adultos mayores son los usuarios a los que deben dirigirse las pruebas neuropsicológicos, entonces se deben seguir las guías de diseño de interfaces gráficas de usuario en dispositivos móviles para adultos mayores. Desde hace una década el diseño de este tipo de interfaces es un área muy activa en el estudio de la Interacción Humano-Computadora. Por otro lado, el especialista debe hacer una planeación de las pruebas y un seguimiento de los pacientes. La planeación puede hacerse a través de la aplicación de un lenguaje visual que le permita programar las pruebas que debe realizar el paciente. Y para el seguimiento puede monitorizar los registros que arrojen las aplicaciones móviles que usan los adultos mayores.

La idea de poder realizar las pruebas en cualquier lugar en cualquier momento permite que el especialista programe la secuencia de pruebas que debe realizar cada paciente y revisar su resultado para darle seguimiento de una forma no presencial. La Computación Móvil permite que los usuarios puedan estar siempre conectados. Además, la CM permite establecer capas de programación para que las aplicaciones funcionen como todo un sistema aunque los usuarios se encuentren en diversos lugares. La mayoría de las aplicaciones exitosas cuentan con este tipo de capas.

El tipo de interacción obliga a las aplicaciones móviles a llamar a servicios externos para realizar algunas tareas. Ejemplo tradicional son los servicios de reconocimiento de voz. Así, diversas pruebas pueden llamar a servicios para proporcionar diversas modalidades de interacción. Además, se pueden llamar a servicios para realizar las evaluaciones de diversas pruebas que requieran de interpretación de texto, voz, o imágenes, que son el resultado de realizar las pruebas en el dispositivo móvil. Estas evaluaciones pueden ser tan complejas que requieren de técnicas de Minería de Datos e Inteligencia Artificial como clasificación, Aprendizaje de Máquina o, en específico, Aprendizaje Profundo (por ejemplo, la prueba de Poppelreuter I y II podría implicar la interpretación de dibujos que realiza el paciente; la prueba de Aprendizaje de Palabras donde el usuario indica por voz un conjunto de palabras que recuerde de una lista que se la ha proporcionado, o la prueba de Contar Historias, donde el paciente debe contar una historia que se la aplicación le ha presentado unos minutos antes). Este tipo de algoritmo ahorraría tiempo al especialista en realizar las valoraciones de sus pacientes. Además, se pueden tener análisis de comportamiento del paciente que podrían ayudar a mejorar la aplicación de las pruebas.

Debido a la complejidad de los algoritmos de IA o de minería que se emplean en el proceso de evaluación, se debe recurrir al uso de programas paralelos que permitan procesar grandes volúmenes de datos complejos en tiempos cortos. El ejemplo más común es utilizar Aprendizaje Profundo para identificación de imágenes, sonidos y texto a través de las bibliotecas de Caffe y TensorFlow. Estas bibliotecas están optimizadas por fabricantes, como Intel y nVidia, para correr en paralelo en procesadores multi núcleo y en tarjetas aceleradoras gráficas.

La tecnología actual permiten la factibilidad del desarrollo de este tipo de herramientas de eSalud. A nivel HCI se tienen guías de diseño para adultos mayores y se conocen las preferencias de los tipos de interacción que puede tener con las Tabletas. El estado actual del CP permite el desarrollo de sistemas con multiples usuarios que puedan ejecutar sus aplicaciones en cualquier lugar y en cualquier momento. Los avances del hardware en los procesadores multi núcleo y tarjetas aceleradoras gráficas, permiten que con CP que sea factible la ejecución de algoritmos de IA como los de Aprendizaje Profundo que requieren de gran poder de cómputo.

BIBLIOGRAFIA

1. Czaja, S., Beach, S., Charness, N., Schulz, R.: Older adults and the adoption of healthcare technology: Opportunities and challenges. In: Technologies for active aging. Springer (2013) 27–46
2. Pak, R., McLaughlin, A.: Designing displays for older adults. CRC Press (2010)
3. Fisk, A.D., Rogers, W.A., Charness, N., Czaja, S.J., Sharit, J.: Designing for older adults: Principle and creative human factors approaches. CRC press (2009)
4. Yamagata, C., Kowtko, M., Coppola, J.F., Joyce, S.: Mobile app development and usability research to help dementia and alzheimer patients. In: Systems, Applications and Technology Conference (LISAT), 2013 IEEE Long Island, IEEE (2013) 1–6
5. Mandala, P.K., Saharana, S., Khana, S.A., Jamesa, M.: Apps for dementia screening: A cost-effective and portable solution. Journal of Alzheimers Disease 47 (2015) 869–872
6. Gansler, D. A., Varvaris, M., & Schretlen, D. J. (2017). The use of neuropsychological tests to assess intelligence. The Clinical Neuropsychologist, 1-14.
7. Hargittai, E., & Dobransky, K. (2017). Old Dogs, New Clicks: Digital Inequality in Skills and Uses among Older Adults. Canadian Journal of Communication, 42(2).
8. Selwyn, N., Gorard, S., Furlong, J., & Madden, L. (2003). Older adults' use of information and communications technology in everyday life. Ageing & Society, 23(5), 561-582.
9. V. Montes de Oca El envejecimiento en el debate mundial: Reflexión académica y política. Papeles de población, 9(35):77-100, 2003.
10. V. Partida Bush. La transición demográfica y el proceso de envejecimiento en México. Papeles de población, 11(45):9–27, 2005.
11. Informe al ejecutivo federal y al congreso de la unión sobre la situación financiera y los riesgos del instituto mexicano del seguro social 2017-2018. Technical report, Instituto Mexicano del Seguro Social, Instituto Mexicano del Seguro Social Reforma No. 476, Colonia Juárez 06600, Ciudad de México., 2018

HYUNDAI TECHNOLOGY | LIFE INSPIRED.

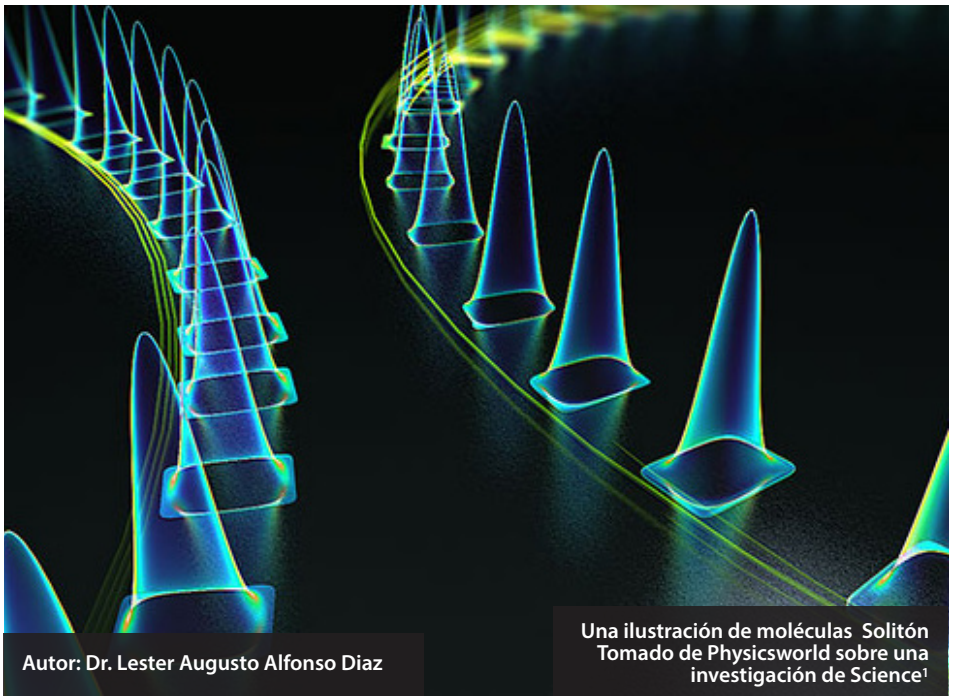
Desarrollando tecnología expresamos nuestra pasión, la pasión en innovar.

Tecnología inspirada para estilos de vida.

www.hyundaitechnology.com

EL MISTERIO DEL SOLITÓN

En 1965, se publicó en la revista científica Physical Review Letters un trabajo que cambiaría el rostro de la física para siempre. En el mismo,los físicos Norman Zabusky y Martin Kruskal resolvían numéricamente en la computadora la ecuación de Korteweg y de Vries (más conocida como KdV en los medios científicos) y encontraban un nuevo tipo de ondas que interaccionaban como partículas.
Dos años antes, en 1963, el meteorólogo y matemático Edward Lorenz resolviendo (también numéricamente) un sistema de ecuaciones derivadas de la dinámica de fluidos en convección, encontraba un tipo de soluciones con un comportamiento sumamente extraño. Bastaba con introducir una pequeña perturbación en las condiciones iniciales del sistema de ecuaciones para obtener soluciones completamente diferentes en el largo plazo. Esta investigación, publicada en la revista *Journal of the Atmospheric Sciences* marcó el inicio el de la teoría del caos y las matemáticas de los atractores extraños.
El denominador común de ambos descubrimientos era el uso de las computadoras para resolver ecuaciones diferenciales no lineales, algo imposible de lograr con los métodos analíticos existentes. Las soluciones numéricas obtenidas ampliaron la comprensión del fenómeno y abrieron el camino a los teóricos. De esta forma las herramientas numéricas se volvieron un complemento importante de la teoría. Más aún, este tipo de investigaciones marcaron el surgimiento de un nuevo tipo de investigadores, cuya herramienta básica es la computadora: los científicos computacionales, que se han extendido a todas las áreas, hoy en día tenemos físicos computacionales, químicos computacionales, especialistas en algebra computacional...la lista puede ser interminable. La revolución solitónica, forma parte de la revolución no lineal iniciada en los años sesenta con los trabajos de Zabusky y Kruskal y Edward Lorenz. Mientras el trabajo de Lorenz llevó a un desarrollo inusitado en la teoría de los sistemas dinámicos, el descubrimiento del solitón le dió un nuevo aire a la física matemática.
Es una especie de Big Bang que continúa hasta hoy en día. Pero remontémonos a los inicios...



Autor: Dr. Lester Augusto Alfonso Diaz

Una ilustración de moléculas Solitón Tomado de Physicsworld sobre una investigación de Science[1]

John Scott Russell (1808-1882)

1. LA ONDA SOLITARIA DE JOHN SCOTT RUSSELL

En agosto de 1834, un ingeniero naval escocés de nombre John Scott Russell galopaba en su caballo a la orilla del Union Canal de Edimburgo, frente a la actual Universidad de HeriotWatt. Observaba el movimiento de una barca tirada por caballos en un canal, cuando esta se detuvo repentinamente y entonces se levantó una gran ola que "fue deslizándose a gran velocidad hacia delante, formando una única ondulación de gran altura; una montaña de agua, redondeada y bien diferenciable, que continuó su recorrido por el canal, sin variar aparentemente su forma o reducir la velocidad." Aquí las letras en cursivas pertenecen a las acotaciones del propio Scott Russell. Se montó inmediata mente en su caballo y persiguió a la enigmática ola, que se movía a una velocidad entre ocho y nueve millas por hora, con una longitud de unos treinta pies, y una altura aproximada de un pie.

Finalmente la ola desapareció entre las curves del canal.
Lo que observó el ingeniero Scott Russell era totalmente inesperado, sus observaciones de la onda solitaria despertaron un gran interés, y muchos científicos de la época trataron de reproducir sus observaciones y aumentó el interés en la teoría de propagación de las ondas.
¿Por qué eran tan inusuales las observaciones de Scott Russell? Bueno, cualquiera ha lanzado una piedra a un estanque. Cuando lanzamos una piedra al centro de un estanque vemos que se forman pequeñas ondulaciones, círculos concéntricos que se propagan hacia la orilla. Estas pequeñas ondulaciones son ondas sinusoidales, y son el mejor ejemplo de ondas lineales. Lo que observamos cuando se propagan estas oscilaciones son sucesiones de crestas y llaves, no un promontorio único, una montaña aislada como observó el ingeniero Scott Russell.
Las ondas se caracterizan por su longitud (L), su frecuencia (ω), y su amplitud A. El período T de una onda no es más que el tiempo entre dos crestas sucesivas, en un punto fijo del espacio. La longitud L es la distancia entre dos crestas consecutivas de la onda. La amplitud de una onda es la altura de la cresta con respecto al nivel en equilibrio del agua de nuestro estanque.
En el caso de ondas superficiales en líquidos, cuando la longitud de la onda es mucho más pequeña que la profundidad del estanque (lo que llamamos aproximación de aguas profundas), la frecuencia de la onda se relaciona con el número de onda k (que es inversamente proporcional a la longitud de onda) a partir de la ecuación:

$$\omega^2 = gk$$

Aquí g es la aceleración de la gravedad. Esta fórmula es conocida como la relación de dispersión para aguas profundas. La otra magnitud importante en la descripción de la propagación de las ondas es la velocidad de fase, que no es más que la velocidad con que se mueven las ondas de determinada longitud. Efectivamente, si en un período T la cresta de una onda avanza una longitud L, entonces su velocidad de fase se calcula como:

$$v_{fase} = \frac{L}{T} = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{g}{k}} \qquad (1)$$

La expresión anterior nos demuestra que la velocidad de la onda es proporcional a su longitud, en otras palabras mientras más distancia entre una cresta y la siguiente, más rápido se mueve la onda. La expresión anterior nos va a permitir introducir un concepto funda mental en la teoría del movimiento ondulatorio, que es la dispersión de las ondas.

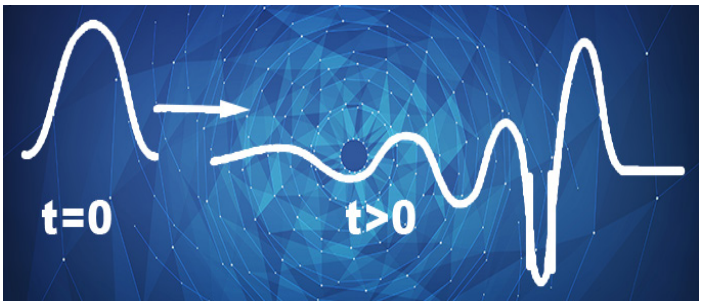


Figura 1. Dispersión de un paquete de ondas

Recordemos que al lanzar una piedra en un estanque, a medida que las ondas se alejan del lugar de origen y se aproximan a la orilla, tal pareciera que se van apagando y desdibujando. La causa de este comportamiento está en el fenómeno de la dispersión. En realidad, cuando lanzamos una piedra en nuestro estanque, se producen muchas ondas de longitudes y amplitudes diferentes. En un inicio todas están apiñadas en el origen, pero a medida que se propagan, las ondas de mayor longitud, por ser más rápidas, se distancian de las más pequeñas. Debido a esto, el paquete ondulatorio original, se va descomponiendo a medida que pasa el tiempo.
Este fenómeno se conoce como dispersión de las ondas, y no es más que la separación de las ondas de diferente longitud. Sin embargo, la onda observada por Scout Russell no se atenía al comportamiento antes descrito.
¿Por qué el paquete de ondas observado en un canal de Edimburgo se negaba a comportarse como las ondas comunes y corrientes? La explicación de este fenómeno está en el carácter no lineal del proceso, que lleva a un equilibrio entre la dispersión, que tiende a descomponer el paquete ondulatorio original, y la no linealidad. Pero antes de ahondar en este tema, posiblemente el lector poco experto se pregunte:

¿Qué es la no linealidad?

¿Qué significa que una ecuación sea no lineal?

2. SOBRE LA NO LINEALIDAD

Todos en la escuela hemos resuelto ecuaciones lineales, y seguramente en nuestras clases de cálculo pudimos conocer las funciones lineales. Un ejemplo de ecuación algebraica lineal es la ecuación:

$$3x + 5 = 0$$

¿Por qué es lineal?, porque la variable aparece con exponente 1. Ejemplo de ecuaciones donde la variable no aparece con exponente 1 son las ecuaciones:

$$3x^2 + 5 = 0 \quad , \quad x^3 + x + 10 = 0$$

En las dos ecuaciones anteriores, el máximo exponente de la variable es 2 y 3 respectivamente. La primera es una ecuación cuadrática, la segunda es una ecuación cúbica. Decimos que son soluciones algebraicas porque las soluciones de las mismas son números. La herramienta fundamental de la física teórica y matemática son las ecuaciones diferenciales. Una ecuación diferencial involucra a determinadas funciones y sus derivadas. Los matemáticos y los físicos teóricos aprendieron a resolver ecuaciones diferenciales a finales del siglo XVII, a partir de los trabajos del gran matemático y naturalista Isaac Newton, y enriquecidos por los aportes de naturalistas como Laplace, Fourier y Euler en años posteriores.

Pues bien, una ecuación diferencial involucra a funciones y sus derivadas, la solución de una ecuación diferencial es entonces una función o una familia de funciones. Una ecuación diferencial es lineal, cuando la función o sus derivadas están al exponente 1. Por ejemplo, la famosa ecuación de onda, que describe las oscilaciones de una cuerda o la propagación del sonido en un fluido (puede ser al aire o el agua), es una ecuación lineal:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

Esta ecuación, como bien dijimos, describe la propagación de ondas sonoras en fluidos, también describe la propagación de ondas electromagnéticas (las ondas hertzianas descubiertas por Hertz en 1888). Por el contrario, la ecuación de Korteweg y de Vries, que discutiremos con más profundidad en la siguiente sección, es no lineal. Esta es una ecuación muy compleja, e involucra derivadas de tercer orden y términos no lineales:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \qquad (2)$$

En este caso, el término no lineal es $u\dfrac{\partial u}{\partial x}$

Para las ecuaciones lineales se han diseñado muchos métodos de solución a lo largo de los años. De hecho, en muchas situaciones, se "linearizan" las ecuaciones no lineales buscando aplicar a las mismas los métodos bien probados para el caso lineal. Pero, ¿qué pasa si el carácter no lineal del fenómeno es lo que realmente nos interesa?

3. ENTRAN EN ESCENA KORTEWEG Y de VRIES

En 1895 Diederick Johannes Korteweg y su estudiante de doctorado Gustav de Vries se lanzaron a estudiar la extraña onda solitaria descubierta por el ingeniero John Scott Russell. Los resultados aparecieron publicados en el trabajo "Sobre el cambio de forma de olas avanzando por un canal rectangular y sobre un nuevo tipo de onda solitaria".

Como hemos dicho anteriormente, la velocidad de la onda (o velocidad de fase) solo depende de la longitud de la onda. En este caso, las ondas más largas van a moverse más rápidamente, lo que lleva a la dispersión del paquete ondulatorio inicial. Pues bien, esto no es del todo cierto. Resulta que la velocidad de fase de la onda no solo depende de la longitud, también depende de la altura de la onda. Solo que esto solamente se cumple cuando estamos en presencia de paquetes de gran amplitud, exactamente del tipo de ondas observadas por Scott Russell en su canal cerca de la ciudad de Edimburgo.

Según Scott Russell, la velocidad de la onda observada depende de su elevación sobre el nivel de la superficie del líquido a partir y se calcula a partir de la relación:

$$c = \sqrt{g(h + \eta)} \qquad (3)$$

Aquí h es la profundidad del canal donde fueron observadas las ondas solitarias, y η es la altura de la onda sobre la superficie no perturbada del líquido. Lo que nos dice esta expresión es que mientras más amplitud tiene la onda (o sea mientras más alta), más rápidamente se desplaza. O sea, que en el caso fuertemente no lineal, cuando las ondas son de gran amplitud, las ondas más grandes se van a mover más rápidamente. Esto es totalmente inesperado, porque para las ondas largas (cuya longitud es mucho mayor que la profundidad del líquido donde se originan), la velocidad de fase es constante y solamente depende de la profundidad ($c = \sqrt{gh}$)

Lo que hicieron de Korteweg y de Vries fue imaginar una situación en que estos dos efectos (dispersión y no linealidad) estuvieran presentes. Encontraron una ecuación diferencial que equilibra ambos efectos, esta es la famosa ecuación de Kortweveg y de Vries (KdV), que mencionamos en la sección anterior.

Ellos encontraron soluciones en forma de onda solitaria de la forma:

$$u(\mathrm{x},\mathrm{t}) = a\,\mathrm{ch}^{-2}\left[\left(\frac{a}{4h}\right)^{2}(x-ct)\right] \qquad (4)$$

Donde h es la profundidad del canal, a es la amplitud de la onda solitaria y

$$\mathrm{ch}(\mathrm{z}) = \frac{\left(e^{z}+e^{-z}\right)}{2}$$

es la función coseno hiperbólico. La onda solitaria (4) de desplaza con velocidad constante

$$\mathrm{c} = c_0\left(1+\frac{a}{2h}\right)$$

En la ecuación KdV el segundo término es responsable de los efectos no lineales, y el tercero es el término dispersivo.

En este momento, con los conocimientos que disponemos, podemos entender perfectamente que fue lo que observó John Scott Russell en su canal cerca de Edinburgo. Evidentemente el impulso que se originó tenía una amplitud suficiente como para que se manifestaran efectos no lineales (dependencia de la velocidad de fase de la amplitud de la onda).

Figura 2. Efecto de la no linealidad sobre la propagación de un impulso

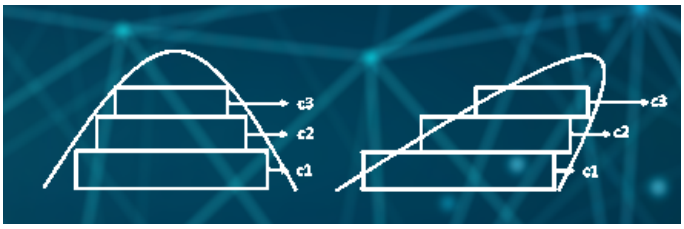


Figura 3. Evolución de una onda inicialmente simétrica debido a los efectos no lineales.

Como se puede observar en las figura 3, la onda tiene a deformarse debido a la dependencia de la velocidad de la altura de la onda:

$$c = \sqrt{g(h+m\eta)} \qquad (5)$$

donde n=1,2,3, h es la profundidad del canal y η es la altura de los bloques representados en las figuras. La onda se deforma debido que la velocidad es diferente para cada bloque

$c^3 > c^2 > c^1$.

Cuando se origina la onda, las partículas en la cresta de la onda se van a mover más rápidamente que las partículas en el valle (ver la figura), todo esto siguiendo la relación (5). El resultado natural sería el de una ola que tiende a romperse (esto lo hemos visto una y mil veces en la playa, cuando rompen las olas al llegar a la orilla, ver la figura). Sin embargo, el proceso de rompimiento se detiene, debido al proceso de dispersión que retrasa a las partí culas en la cresta, y acelera a las cercanas al valle del impulso inicial, el resultado es una onda de forma constante, resultado del equilibrio entre dispersión y no linealidad.

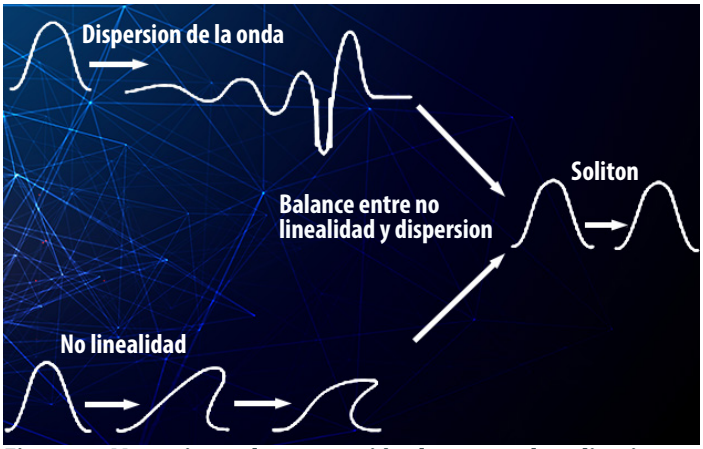


Figura 4. Mecanismo de generación de una onda solitaria: Balance entre dispersión y nolinealidad (tomado de Brunelli , (2000)).

El trabajo de Korteweg y de Vries fue olvidado durante muchos años. En la biografía de Korteweg, escrita en 1946, ni siquiera se hace mención del importante logro de 1895. Sin embargo hoy en día, no existe libro contemporáneo dedicado al tema de las ondas no lineales donde no se haga mención del mismo.

4. 1955: EXPERIMENTO NUMÉRICO DE FERMI, PAST Y ULAM

Estamos en el Laboratorio Nacional de los Álamos, es el año 1955. Los Álamos es mundialmente conocido por la fabricación de la bomba atómica. Hace casi ochenta años, en 1942, muchos de los mejores cerebros del mundo fueron concentrados cerca del otrora desconocido pueblo de los Álamos y trabajaron durante tres años en el proyecto Manhattan.

Enrico Fermi era uno de los principales colaboradores del proyecto, y tiene el mérito de haber construido el primer reactor nuclear de la historia, bajo las gradas del estadio de la Universidad de Chicago, el 7 de diciembre de 1942. Fue uno de los creadores de la moderna teoría cuántica (recordemos la estadística Fermi Dirac), pero sus mayores logros están asociados con la física atómica y nuclear. Pues bien, en 1955, Fermi, junto con los matemáticos Pasta y Ulam, estaba retomando un estudio de 1914 del físico Debye sobre la conductividad calorífica de los cuerpos sólidos. La hipótesis de Debye era que en el caso de los sólidos, la conductividad térmica era resultado de interacciones no lineales entre los átomos de la red cristalina.

Según el modelo del gas ideal, las moléculas de un gas se modelan como esferas en movimiento desordenado. De este sencillo modelo se pueden extraer muchas conclusiones. Si en un gas ideal introducimos un grupo de moléculas en movimiento rápido, con el decursar del tiempo, debido a los choques entre las mismas, ocurre una transferencia de movimiento al resto de las demás moléculas del gas. Al final, en el estado de equilibrio termodinámico, cada molécula va a tener una energía media igual a

$$\frac{3kT}{2}$$

donde k es la constante de Boltzman. Esto es lo que en el argot físico se llama termalización. Este tipo de modelo explica de forma satisfactoria el fenómeno de transferencia de calor en un gas.

A principios de siglo, a muchos científicos les interesaba obtener las propiedades de conductividad de los sólidos desarrollando modelos análogos a los de un gas ideal. La idea era concebir al cuerpo sólido como una cadena de osciladores no armónicos. Si denotamos a yn como la desviación de la molécula de masa m con número n de la posición de equilibrio, entonces la segunda ley de Newton nos permite escribir la ecuación diferencial para el movimiento de cada oscilador en la forma:

$$m\frac{d^2y_n}{dt^2} = k\left(y_{n+1} - y_n\right) + k\left(y_n - y_{n-1}\right) \qquad (6)$$

En la parte derecha de esta ecuación están las fuerzas que actúan sobre la molécula analizada por parte de los resortes situadas a la izquierda y a la derecha. Esta sencilla ecuación no es más que el resultado de aplicar la ley de Hook al movimiento de la molécula en nuestra red cristalina. Este sencillo modelo lineal no dio resultados satisfactorios. Resulta que si suponemos interacciones como las descritas en la ecuación (10), la energía nunca se transfiere a los diferentes modos o armónicos de la red cristalina. De ahí nació la idea de asumir un tipo de interacción no lineal entre los átomos de la rejilla.

En este caso la ecuación del movimiento para los átomos tiene la forma: $m\frac{d^2y_n}{dt^2} = k\left(y_{n+1} - 2y_n + y_{n+1}\right) + k\alpha\left[\left(y_{n+1} - y_n\right)^2 - \left(y_n - y_{n-1}\right)^2\right]$

La idea fue propuesta por el físico Debye en 1914. A este tipo de rejilla no lineal la llamaron rejilla cúbica. En este momento de la historia entraron en juego las computadoras. Fermi y sus colegas decidieron resolver el problema propuesto por Debye numéricamente. Integraron las ecuaciones no lineales (7), considerando que la energía inicialmente estaba concentrada en uno de los modos de oscilación del sistema. La idea era ver con qué rapidez se transfería a los otros modos de la rejilla. El tiempo de relajación para que esto ocurriera, les daría una idea del coeficiente de difusión del sistema. Al final ocurriría la equipartición de la energía, de forma análoga a como se transfiere el calor en un líquido o un gas. Las rejillas utilizadas en las simulaciones numéricas tenían 64 osciladores y fueron resueltas en la computadora MANIAC I.La computadora MANIAC I (Mathematical and Numerical Integrator and Computer) fue construída bajo la dirección de Nicholas Metropolis en Los Alamos Scientific Laboratory. Se basaba en la arquitectura diseñada por Von Neumann, que también la bautizó. Como condición inicial para integrar el sistema de ecuaciones, consideraron que la energía estaba concentrada en uno de los modos de oscilación del sistema. Se esperaba que con el transcurrir del tiempo la energía se transfiriera a los demás modos de oscilación, de la misma manera que al introducir una fuente de calor en un gas, la energía se transfiere a todo el gas mediante el movimiento caótico de las molé culas. Los resultados fueron sorprendentes: el sistema no se termalizaba, la energía no se transfería a todos los modos, solo a unos pocos, y en un tiempo posterior, pero finito, se volvía a concentrar en el modo más bajo. No ocurría la equipartición de la energía, su distribución uniforme entre todos los oscila dores. El análisis del problema de Fermi, Past y Ulam (de ahora en adelante problema FPU) llevó al planteamiento de muchos teorías. Una de ellas, como veremos, llevó al descubrimiento de la interacción elástica de ondas solitarias y al descubrimiento del solitón.

5. AÑO 1965: ONDAS QUE INTERACTÚAN COMO PARTÍCULAS: SURGE EL TERMINO SOLITON

El boom de la teoría de los solitones comenzó en 1965 cuando los investigadores Norman Zabusky y Martin Kruskal publicaron el trabajo "Interactions of solitons in collisionless plasma and the recurrence of the initial states", en la revista Physical Review Letters. En este trabajo surgió por primera vez el término solitón. La motivación inicial fue el trabajo de FPU. En especial a Martin Kruskal le interesaba por qué existía recurrencia en el sistema de osciladores.

Los osciladores descritos por el sistema de ecuaciones (9) son un sistema discreto. Zabusky y Kruskal analizaron el caso de un sistema ideal con un número infinito de osciladores. En este caso, estamos en presencia de un sistema continuo, y para la descripción del mismo necesitamos una ecuación en derivadas parciales. Zabusky y Kruskal analizaron el sistema FPU para el límite de un número infinito de osciladores y encontraron: ¡Nada más y nada menos que la ecuación de KdV!

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

La misma ecuación obtenida por Diederick Johannes Korteweg y Gustav de Vries en 1895. Recordemos que Korteweg y de Vries obtuvieron su ecuación analizando el problema de la propagación de ondas en la superficie de un líquido. En el caso del problema analizado por Zabusky y Kruskal, se analizaba la propagación de ondas en una rejilla no lineal.

Después de obtener su ecuación, Zabusky y Kruskal la resolvieron numéricamente en la computadora. Una ecuación diferencial tiene infinitas soluciones, y para elegir una de esas soluciones, necesitamos conocer como es nuestra solución en el momento inicial. Esta función que seleccionamos en el momento inicial, la llamamos condición inicial de nuestro problema, de esta forma seleccionamos una única función del conjunto infinito de soluciones de nuestro problema.

La onda solitaria de Scott Russell interacciona con otras de su misma clase de una forma sorprendente para ser soluciones de una ecuación no lineal. Cuando dos de estos solitones chocan, tras un tiempo de interacción no lineal emergen de la región de colisión preservando la forma inicial, de la interacción sólo queda un retraso o desfase. En la siguiente figura observamos la colisión de dos solitones de la ecuación KdV. El comportamiento de las ondas obtenidas en el ordenador era bastante inusual.

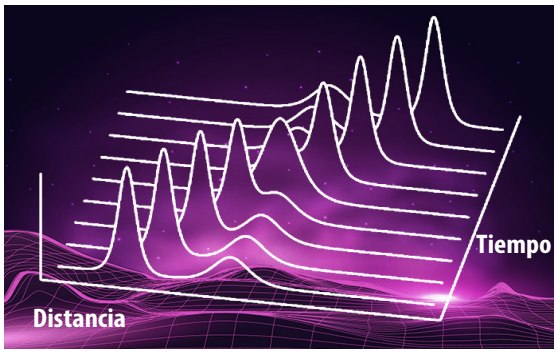


Figura 5. Colisión de dos solitones. El impulso de mayor amplitud alcanza al de menor amplitud. Los dos solitones emergen de la colisión con sus identidades intactas. El perfil de las ondas es mostrado para diferentes tiempos.

Viéndolo en terminos de la teoría hidrodinámica, Zabusky y Kruskal hicieron que chocaran entre sí dos ondas solitarias como las observadas por Scott Russell en la pantalla de su computadora. El resultado fue inesperado. Se esperaba que en el encontronazo, las ondas se destrozasen. Nada más lejos de la realidad. En lugar de desaparecer, de las olas rotas por el choque surgieron otras intactas, que continuaron avanzando, como si nada hubiera pasado. Parecía como si cada una de las ondas solitarias conservara su identidad primitiva, y fuera capaz de elevarse de nuevo. Este nuevo tipo de ondas capaces de conservar su identidad después de interactuar de forma no lineal con sus semejantes, fueron bautizadas como solitones. A partir del descubrimiento de la interacción no lineal hecho por Zabusky y Kruskal, comenzó el boom de los solitones y las ondas no lineales que continua hasta hoy en día. El segundo paso importante en esta evolución fue el descubrimiento por Gardner, Greene, Kruskal y Miura de un método para resolver la ecuación KdV.

Este método, conocido como el Inverse Scattering Transform (IST), fue aplicado exitosamente a la solución de la ecuación KdV, y después a otras ecuaciones como la nolineal de Schrödinger, y la ecuación sine-Gordon. Hasta hoy en día sigue la aplicación del método a diferentes situaciones en las ciencias naturales, en un trabajo intensivo que involucra a matemáticos y físicos de muchas áreas diferentes.

Con el descubrimiento del solitón por Zabusky y Kruskal y del método del Problema Inverso de Dispersión (Inverse Scattering Transform, IST), termina la segunda etapa y el comienzo del boom solitónico. La segunda etapa continúa hasta nuestros días, con la aplicación del descubrimiento a las más diversas áreas del conocimiento, y la combinación de métodos numéricos y analíticos en la solución de los problemas.

En la actualidad, las aplicaciones de los solitotes van desde la hidrodinámica y los fluídos geo físicos, hasta la biología y la óptica no lineal, donde actualmente se experimenta con la utilización de paquetes solitónicos para la transmisión de la información.

[1] Herink, G., et al. "Real-time spectral interferometry probes the internal dynamics of femtosecond soliton molecules." Science 356.6333 (2017): 50-54.

Brunelli, J. C. "Dispersionless limit of integrable models." Brazilian Journal of Physics 30.2 (2000): 455-468.

INTELIGENCIA ARTIFICIAL: EL DESAFIO COMPUTACIONAL PARA EL FUTURO

Autor: Jose María Zamora

I. ANTECEDENTES

En los últimos 30 años, la humanidad ha conocido los avances tecnológicos más importantes para el desarrollo de su especie. En la línea del cómputo, podemos recordar que hace 25 años una supercomputadora podía ocupar un piso completo de un edificio, en estos días, un teléfono celular en la palma de la mano, puede realizar la misma cantidad de operaciones. Todo esto, sin considerar, que en este momento se pueden almacenar decenas de gigabytes de información distribuidos físicamente en continentes diferentes (la nube).

En este sentido, en los últimos 10 años ha nacido una explosión tecnológica en dos direcciones: 1) el crecimiento exponencial del hardware (componentes computacionales físicos) y 2) el desarrollo masivo de aplicaciones, en particular en el campo de la Inteligencia Artificial (IA). El propósito de este artículo es revisar este fenómeno.

II. DESARROLLO DE HARDWARE

El aumento de transistores incorporados en las obleas de silicio que tienen los procesadores de cómputo (hardware) sigue creciendo (Veáse fig.1).

Sin embargo, la frecuencia de reloj (velocidad) con la que funcionan las unidades de procesamiento (CPUs, por sus siglas en inglés) se ha estancado en los últimos 10 años. Una razón elemental es la dificultad técnica y el costo que implica enfriar este tipo de componentes, además del gasto energético de este proceso.

En años recientes se ha explorado la posibilidad de sumergir servidores de cómputo en el mar [1], también existen opciones comerciales para sumergir equipos de cómputo masivo en aceites [2].

Así pues, surge una pregunta fundamental, ¿Dónde está reflejado el incremento de transistores en la tecnología?. La respuesta está mostrada en la figura 1, la cual indica que están ubicados en el crecimiento del número de núcleos. Debido a esto, los procesadores son más rápidos ahora. Por otro lado, hay que recordar que un procesador tiene subunidades independientes de cómputo (núcleos ó *cores*), las cuales ejecutan instrucciones codificadas en los programas ó aplicaciones. Los núcleos comparten algún nivel de memoria cache, pero acceden de forma independiente a la memoria RAM. Esto permite ejecutar en paralelo tareas iguales sobre datos diferentes (instrucciones SIMD). En resumen, los núcleos son los trabajadores reales del procesador. Hoy en día, las CPUs gastan una cantidad enorme de su tecnología en sincronizar y controlar estas subunidades, y siempre existe el reto de integrar cada vez más núcleos en un sólo procesador, esto con la finalidad de realizar una mayor cantidad de instrucciones en paralelo. Los fabricantes de procesadores en los últimos años han

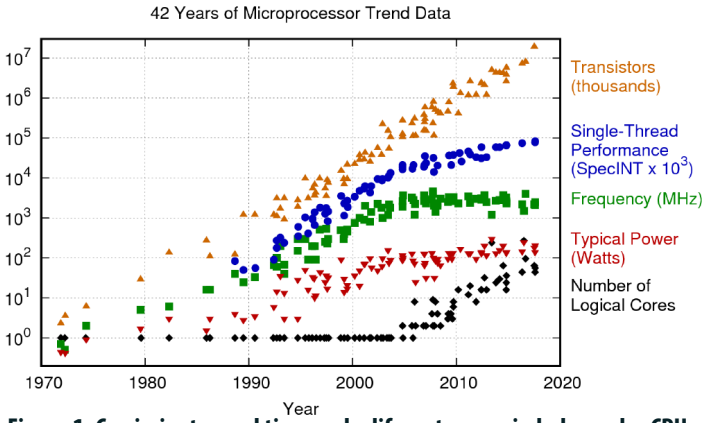
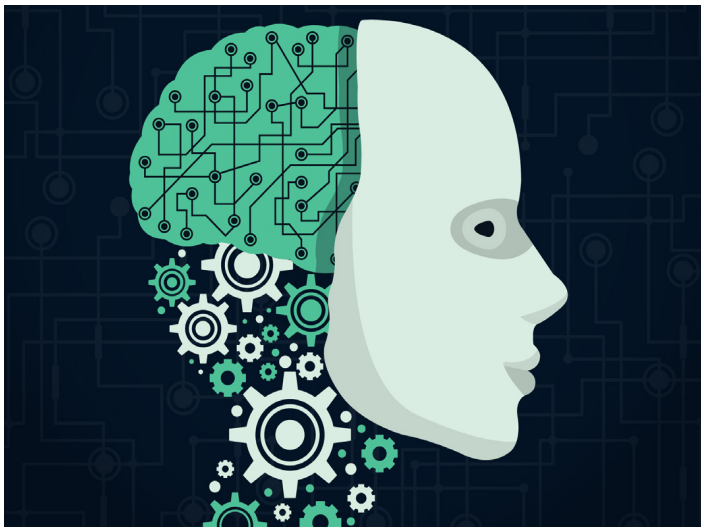


Figura 1. Crecimiento en el tiempo de diferentes propiedades en las CPUs

desarrollado unidades con un número de núcleos como nunca se había visto antes (un promedio de 72 núcleos en cada chip de procesamiento) [3].

Con la integración antes descrita, han emergido tecnologías muy novedosas como las GPUs (Unidades de procesamiento gráfico). Evitando el término técnico, estas unidades son esencialmente: ¡Tarjetas de video!. Y hasta hace 10 años, sólo servían para pintar imágenes nítidas en despachos de diseñadores gráficos. También destacaban para jugar videojue- gos más reales ó hacer renders de comerciales y caricaturas en televisión. En esta misma línea histórica, IBM en algún momento desarrolló un procesador para una consola de video-juegos (Playstation 3) llamado Cell. Tras su lanzamiento, estas consolas ayudaron al desarrollo de la biología computacional, específicamente en el campo del plegamiento de proteínas, contribuyendo al combate de diferentes enfermedades [4]. Este acontecimiento es uno de los primeros cruces de la tecnología "comercial" con aplicaciones de ciencia básica. También se han desarrollado procesadores de muy bajo consumo energético (≈ 40 watts), un pionero de estos procesadores es ARM® . Estas CPUs son muy básicas, sin embargo, cada vez son más potentes e incluyen un set de instrucciones más amplio. Aunque todavía no se listan supercomputadoras en el Top500 (ranking de las supercomputadoras más rápidas del planeta) usando estas arquitecturas, actualmente ya existen proyectos con ARM® que destacan en soluciones de cómputo ecológico [5]. Es importante señalar, que de todas las tecnologías emergentes en la nueva era del supercómputo, la más exitosa y popular por su poder y bajo costo, han sido las GPUs. Estas tarjetas aceleradoras de cálculo numérico es un desarrollo del fabricante Nvidia®, principalmente.



Si examinamos exhaustivamente el listado de las 500 computadoras más rápidas del planeta [6], 146 de ellas contienen aceleradores GPU (¡Tarjetas de video utilizadas para cálculo numérico!), estando en este grupo las dos supercomputadoras más rápidas del planeta (SummitySierra, ubicadas físicamente en EUA).
Haciendo un resumen, los aceleradores de cálculo (GPU, Cell®, ARM®, etc...) son arquitecturas computacionales de- dicadas a hacer cientos de operaciones numéricas muy específicas en paralelo (sumas y multiplicaciones) con una velocidad media-alta.
Es importante destacar, que los aceleradores al ser unidades dedicadas, pierden generalidad en sus operaciones de control. Por ejemplo: una GPU puede ser super rápida para multiplicar una matriz de números, pero al mismo tiempo, es super lenta para guardar un archivo en disco ó enviar un dato por la tarjeta de red. En este sentido, las CPUs tradicionales ganan camino al ser unidades de procesamiento genéricas, no tan rápidasparaoperaciones numéricas y vectoriales como las GPUs. Sin embargo, pueden comunicarse con cualquier tarjeta de red, cualquier tarjeta de fibra óptica, cualquier monitor y entienden cualquier periférico como puede ser un lector de código de barras. Fabricantes como Intel®, los cuales tienen nichos de mercado clásicos copados (cómputo administrativo ó sistemas financieros, por ejemplo) se han incorporado a la competencia de aceleradores de cálculo numérico con productos como: Xeon Phi® ó Neural Compute Stick 2®[7].

III. DESARROLLO MASIVO DE APLICACIONES

Al margen del desarrollo descrito en la sección anterior, en los últimos 10 años, ha explotado el uso masivo de plataformas de colaboración para el desarrollo (programación) de aplicaciones,dos ejemplos son:GitHub® ó GoogleColab® Estas plataformas sirven como elemento principal para la programación de código fuente en colectivo sobre proyectos específicos. En particular, GitHub® fue fundada en 2008 y hoy en día cuenta con 34 millones de usuarios y más de 100 millones de proyectos. El objetivo de los proyectos, van desde almacenamiento de tutoriales, hasta el housing de los frameworks más modernos para IA como TensorFlow. También, se destaca por ser una plataforma estandar para el desarrollo de proyectos científicos, contribuyendo al co- nocimiento en áreas como la bioinformática, el desarrollo de fármacos, la química computacional, el estudio de física de altas energías, simulación del clima, simulación de estructuras (puertos, edificios, etc...). Es importante señalar, el código fuente disponible en estas plataformas no es gratis, pero sÍ es libre.
La mayoría de los proyectos adhieren a las licencias del tipo GPL ó MIT, las cuales tienen sus reglas específicas y claras [8].
Estas plataformas han hecho una contribución enorme al crecimiento exponencial en el desarrollo de aplicaciones de IA. Programadores de todo el mundo (jóvenes en su mayoría) usan el código ya desarrollado, para crear sus propias soluciones a problemas como el reconocimiento de patrones en imágenes ó reconocimiento del lenguaje natural ó un sistema de sugerencias de ventas por Internet.
Al mismo tiempo, este fenómeno ha impulsado la convergencia entre los proyectos de programación con el uso de tecnologías emergentes cada vez más poderosas como las GPUs ó Neural Compute Stick 2®. Esta convergencia, es una de las grandes componentes para que hoy en día, eldesarrollo de aplicaciones usando IA sea uno de los campos con mayor proyección a futuro para la humanidad.

IV. INTELIGENCIA ARTIFICIAL

¿Qué es la Inteligencia Artificial?. Existen muchas definiciones, y la respuesta incluso ha generado debates que tienen más de 50 años, que terminan en preguntas como: ¿Las máquinas pensarán algún día? ¿Las máquinas acabarán con la humanidad?. Para los efectos de este artículo, nos conviene usar una definición técnica y sencilla. La IA es la aplicación de métodos numéricos y estadísticos que involucran a las computadoras en procesos de clasificación y modelación. Los algoritmos de IA, en general, se componen de dos etapas: 1) el entranimiento y 2) la prueba. La salida de estos procesos es un modelo que se pone en producción con datos reales. Como se puede imaginar, una condición muy importante en este tema es tener muy buena cantidad y calidad en los datos de entrenamiento y prueba. Es importante señalar que las etapas de entrenamiento y prueba son las másdemandantes en cómputo, casi siempre por su naturaleza de ser operaciones vectoriales

y matriciales. Y en este punto, es donde convergen las tecnologías antes mencionadas (GPUs, ARM, Neural Com- pute Stick 2® , etc). Inclusive, los fabricantes de procesadores convencionales como Intel® , han puesto en marcha la adición de hardware optimizado para instrucciones específicas de IA en la gama de sus nuevos procesadores Cascade Lake [9], lo cual puede hacer a los procesadores genéricos, maquinas más rápidas para inferir problemas de IA.

Entre los problemas a resolver por la IA se encuentran los clasificadores, un ejemplo clásico es la sugerencia de películas o productos, aquí lo que se clasifica es: ¿que tipo de usuario o comprador es?. Entonces, a partir de un histórico de compras y otros datos cruzados la máquina puede elegir productos para sugerir casi correctamente. Otro ejemplo de clasificación, es la selección de imágenes médicas para pronosticar enfermedades. Hoy en día, cualquier programador puede empezar a desarro- llar su propio clasificador de muestras histológicas para saber si es probable encontrar un cáncer o no en un conjunto de imágenes tumorales.

Por otro lado, un problema clásico de modelación es el ajuste de funciones, lo cual no es un problema trivial cuando el conjunto de datos tiene muchas variables. En este sentido, las redes neuronales y otras técnicas han sido aplicadas para la solución de regresiones en la simulación del clima, mercados financieros, etc [10].

Más globalmente, el desarrollo de frameworks (o marcos de trabajo) ha crecido enormemente. Un framework contiene todas las funciones y métodos para implementar algún paquete aplicativo, puede ser sinónimo de librería. En el caso particular de la IA, algunos de los frameworks que se destacan son:

Tensorflow usado por Google, Pytorch usado por Facebook, Azure desarrollado por Microsoft y del lado más general Keras ó Theano. También es importante señalar que las técnicas más populares implementadas en estos frameworks son las redes neuronales de diferentes tipos.En conjunto, la democratización de la programación en repositorios como GitHub®, además del crecimiento y el bajo costo de la tecnología de cómputo(CPUs y GPUs) ha catalizado el desarrollo de aplicaciones que ya están integradas de manera común en la vida cotidiana del ser humano pro- medio. Algunos ejemplo son: el reconocimiento del lenguaje natural, reconocimiento facial, operaciones de sugerencias en plataformas con servicio de streaming para películas ó libros, sugerencias de texto en los celulares, e incluso el simple apagado automático de la pantalla en un celular con el objetivo de ahorrar energía. En áreas del tipo científico, la IA ya es una técnica de empleo común y destaca en ejemplos categorización de enfermedades como el cáncer y la sugerencia automatizada de tratamientos farmacológicos dirigidos [11].

sugerencia automatizada de tratamientos farmacológicos dirigidos [11].

Toda esta revolución tecnológica también se da en el marco de un crecimiento exponencial en el almacenamiento de datos. Actualmente, ya existen servidores con la capacidad de almacenar un petabyte en 1U, es decir, en la mesa de un escritorio. Además, existe la posibilidad de que este mismo servidor tenga la capacidad de procesamiento para ejecutar los algoritmos de IA más demandantes.

En resumen, es sabido que la humanidad enfrenta muchos desafíos tecnológicos. Como se muestra en este artículo, en menos de 30 años se han rebasado barreras computacionales inimaginables. Sin embargo, hay que tener en claro que las computadoras todavía no resuelven problemas fundamentales de salud ó inclusive de modelos financieros sencillos. Pero el camino ya es claro y está zanjado. La humanidad ya abrió un universo de posibilidades para el desarrollo de nuevas ideas, sobre todo para el programador común y corriente. En un tiempo no muy largo, las computadoras serán la solución humana a la mayoría de los problemas claves de su existencia, como son la salud y la justicia.

[1] Microsoft. Microsoft sea project. https://www.youtube.com/watch?v=AvvJc4Uw3aA. Accessed on 2019-09-11.

2] Green Revolution Cooling. Home page. https://www.grcooling.com. Accessed on 2019-09-11.

3] GNU. Multicore processor. https://en.wikipedia.org/wiki/Multi- core processor. Accessed on 2019-09-11.

4] FoldingAtHome. Home page. https://foldingathome.org/project- timeline/. Accessed on 2019-09-11.

5] Top 500 Green. Home page. https://www.top500.org/news/sandia-to- install-first-petascale-supercomputer-powered-by-arm-processors/. Ac- cessed on 2019-09-11.

6] Top 500. Home page. https://www.top500.org/lists/2019/06/. Accessed on 2019-09-11.

7] Neural Compute Stick. Home page. https://software.intel.com/en- us/neural-compute-stick. Accessed on 2019-09-11.

8] Git HUb Licenses. Home page. https://choosealicense.com/licenses/. Accessed on 2019-09-11.

[9] Intel Deep Learning. Home page. https://www.intel.ai/intel-deep- learning-boost/#gs.36lke8. Accessed on 2019-09-11.

10] Stephan Rasp, Michael S. Pritchard, and Pierre Gentine. Deep learning to represent subgrid processes in climate models. Proceedings of the National Academy of Sciences, 115(39):9684–9689, 2018.

11] Yu-Chiao Chiu, Hung-I Harry Chen, Tinghe Zhang, Songyao Zhang, Aparna Gorthi, Li-Ju Wang, Yufei Huang, and Yidong Chen. Predicting drug response of tumors from integrated genomic profiles by deep neural networks. BMC Medical Genomics, 12(S1):18, January 2019.

DENTRO DE LUFAC

RENDIMIENTO EN TARJETAS GPU

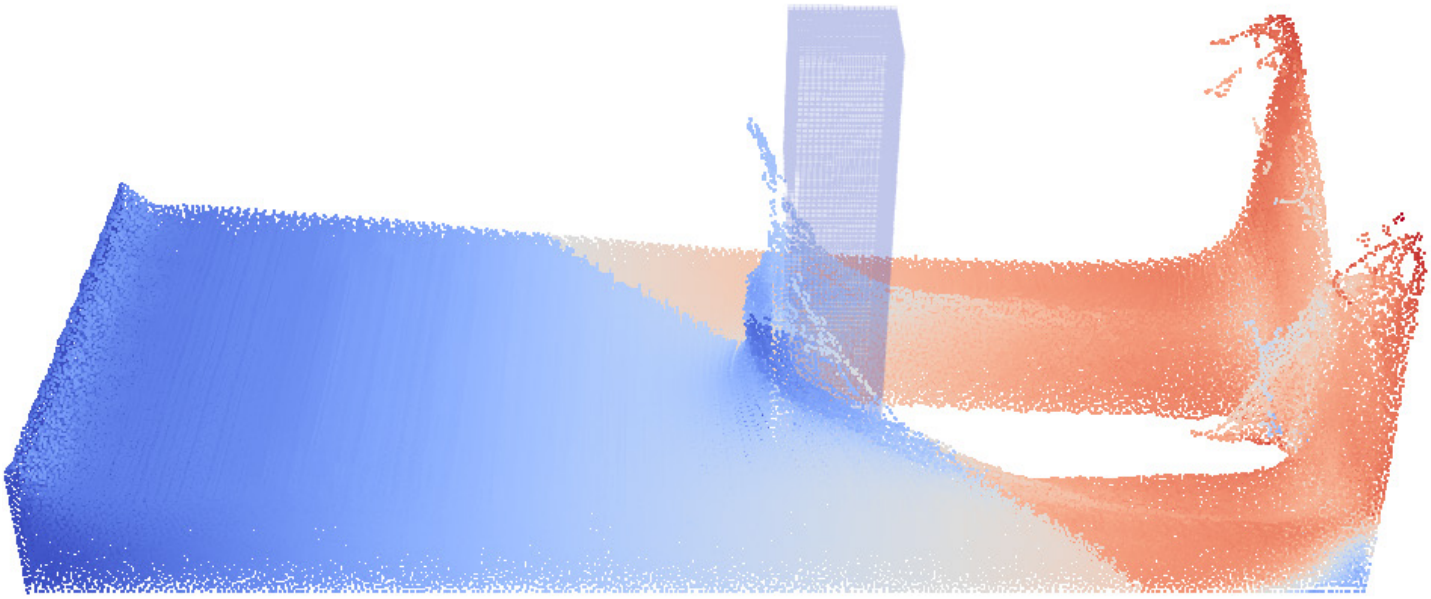
Recientemente, especialistas del grupo de Investigación y Desarrollo (I+D) de LUFAC Computación, realizaron pruebas de rendimiento y precisión con Intel® Xeon® Scalable Processor (Skylake) 5120) e Intel® Xeon® Processor E5 (Sandy Bridge EP 2630) utilizando las tarjetas V100, GTX1080ti, GTX1080, RTX2080. Las simulaciones se realizaron utilizando el siguiente software:

A) HOOMD-blue. HOOMD-blue es el primer código MD de propósito general construido desde cero para la aceleración de GPU, y ha sido desarrollado activamente desde marzo de 2007. Es compatible con una variedad de campos de fuerza e integradores dirigidos a simulaciones de materia blanda. Es un proyecto de código abierto, numerosos desarrolladores han contribuido con adiciones de funciones útiles al código principal. Un alto rendimiento, es la primera prioridad de diseño en el desarrollo de HOOMD-blue. Con los años, se han reescrito los núcleos de computación centrales varias veces para obtener el mejor rendimiento posible para cada generación de hardware en GPU. La facilidad de uso es la segunda prioridad. Los scripts de trabajo en Python, permiten a los usuarios fácilmente configurar y controlar sus simulaciones. Las buenas prácticas de ingeniería de software orientadas a objetos aseguran que el código de HOOMD-blue sea fácil de ampliar, tanto para los usuarios como para los desarrolladores. Extensas pruebas de validación muestran que HOOMD-blue produce resultados correctos.

Tarjeta Nvidia Tesla v100

B) GROMACS. GROMACS es una implementación paralela por memoria distribuida basada en la técnica de dinámica molecular (MD, el cual es útil para la simulación de moléculas biológicas (macro) en un entorno acuoso. El software se ha desarrollado para un anillo de 32 procesadores diseñado a medida para un crecimiento de procesadores. GROMACS (GROningen MAchine for Chemical Simulation) consta de un preprocesador, un motor de Dinámica Molecular paralelo y un programa de minimización de energía que puede usar un número arbitrario de procesadores, un monitor de procesos y varias herramientas de análisis. Los programas están escritos en ANSI C y están disponibles por FTP. La funcionalidad se basa en el paquete GROMOS (GROningen MOlecular Simulation). GROMACS incluye programas de conversión entre formatos GROMOS y GROMACS. El motor de Dinámica Molecular puede manejar condiciones a la frontera periódicas rectangulares con escala de temperatura y presión. Las interacciones que pueden manejarse sin modificaciones son interacciones variables de pares no unidos con potenciales de Coulomb y Lennard-Jones o Buckingham, utilizando un límite de doble rango basado en grupos de carga, e interacciones unidas fijas de tipo armónico o de restricción para links y ángulos de enlace e interacciones periódicas o de la serie de potencias del coseno para ángulos diédricos. Se pueden agregar fuerzas especiales a grupos de partículas (para dinámicas de no equilibrio o para restricción de posición) o entre partículas (para restricciones de distancia). El paralelismo se basa en la descomposición de partículas. La comunicación entre procesadores se limita en gran medida a la distribución de posición y fuerza sobre el anillo una vez por cada paso de tiempo.

C) LAMMPS. LAMMPS es un código clásico de dinámica molecular con un enfoque en el modelado de materiales. Es un acrónimo de Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. LAMMPS tiene potencial para materiales de estado sólido (metales, semiconductores) y materia blanda (biomoléculas, polímeros) y sistemas de grano grueso o mesoscópico. Se puede usar para modelar átomos o, más genéricamente, como un simulador de partículas paralelo a escala atómica, meso o continua. LAMMPS se ejecuta en procesadores individuales o en paralelo utilizando técnicas de paso de mensajes y una descomposición espacial del dominio de simulación. Muchos de sus modelos tienen versiones que proporcionan un rendimiento acelerado en CPU, GPU e Intel Xeon Phi. El código está diseñado para ser fácil de modificar ó ampliar con una nueva funcionalidad. LAMMPS se distribuye como un código fuente abierto bajo los términos de la GPL. Todo el desarrollo de LAMMPS se realiza a través de GitHub. LAMMPS es distribuido por Sandia National Laboratories, un laboratorio del Departamento de Energía de EE. UU.



El método de hidrodinámica de partículas suavizadas (SPH) es un método lagrangiano para la simulación de flujo de fluidos. En SPH, el medio continuo se discretiza en un conjunto de partículas que interactúan entre sí y se mueven a la velocidad del fluido.

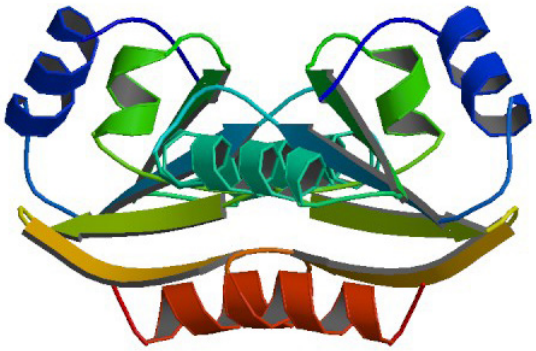
D) GPUsph. La simulación numérica de fluidos es un tema importante en investigación básica con aplicaciones en varios campos, que van desde la ingeniería mecánica hasta la astrofísica, con efectos particulares en la protección civil. Actualmente, se encuentran disponibles una variedad de modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD), algunos especializados para fenómenos específicos (choques, evolución térmica, interacción fluido / sólido, etc.) o para fluidos con características reológicas específicas (gases, agua, barro, petróleo, gasolina, lava, etc.). El modelo de hidrodinámica de partículas suavizadas (SPH), desarrollado inicialmente por Ginghold, Monaghan y Lucy, ha visto un creciente interés en los últimos años, gracias a su flexibilidad y la posibilidad de aplicación a una gran variedad de problemas. SPH tiene el costo de consumir muchos recursos computacionales en comparación con otros métodos (por ejemplo, métodos de malla como diferencias finitas o volúmenes finitos). Sin embargo, ya que expone un alto grado de paralelismo, su implementación en plataformas de computación paralela masiva (GPU) es conceptualmente directo, reduciendo significativamente la ejecución tiempos para simulaciones. Así pues, GPUSPH fue la primera implementación de la hidrodinámica de partículas suavizadas débilmente compresibles (WCSPH) que se ejecutó completamente en GPU con CUDA. La versión inicial fue desarrollada por Alexis Hérault (INGV, CNAM), Giuseppe Bilotta (DMI, INGV) y Robert A. Dalrymple (JHU).

Los resultados muestran que, para todos los códigos, el mejor rendimiento (step per seconds, seconds, nano seconds per day y time step per second) se obtuvieron con la tarjeta V100. La tarjeta GTX1080ti fue la segunda en rendimiento para los códigos GPUsph, GROMACS y LAMMPS, y la tercera para el código HOOMD. Las menores aceleraciones se obtuvieron para la tarjeta RTX2080. Sin embargo, todas superaron en aceleración al procesador E5-2630. Estos resultados confirman que las GPUs siguen siendo las mejores opciones por su relación costo-beneficio para una gama especifica de códigos de simulación numérica.

RENDIMIENTO DE SIMULACIONES MOLECULARES CON NAMD EN TECNOLOGÍAS GPU Y MULTICORE.

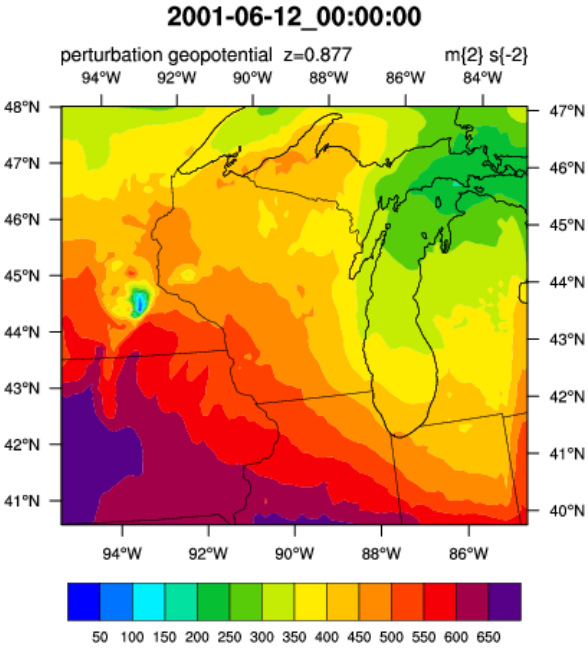
Recientemente, un equipo de investigadores y colaboradores de LUFAC Computación, reportaron los resultados obtenidos con NAMD (Not (just) Another Molecular Dynamics profram) en diferentes arquitecturas GPU y multicore. Se realizaron simulaciones de dinámica molecular clásica para tres sistemas biomoleculares:

1) Thioredoxina con 14537 átomos
2) Canal de potasio KcsA con 45,297 átomos
3) Unidad F1 de la ATPasa con 327,506 átomos.



Modelo molecular de cintas de la Thioredoxina

Los resultados de las simulaciones mostraron que las GPUs (debido a su relación costo beneficio) siguen siendo la mejor opción para simulaciones de dinámica molecular. Se pretende realizar un estudios similar con los códigos LAMMPS y GROMACS para analizar rendimientos entre aplicaciones.



WEATHER RESEARCH AND FORECASTING (WRF)

Especialistas del área de Investigación y Desarrollo (I+D) de LUFAC Computación, recientemente reportaron los resultados obtenidos con el modelo Weather Research and Forecasting para diferentes procesadores. El modelo Weather Research and Forecasting (WRF) es un modelo de predicción numérica del tiempo diseñado tanto para investigación como para aplicaciones operativas (en servicios meteorológicos, por ejemplo). WRF implementa una extensa gama de aplicaciones meteorológicas en escalas que van desde los cientos metros a los miles de kilómetros. Se empezó a desarrollar a finales de la década del 90 en los Estados Unidos, con la colaboración del Centro Nacional de Investigaciones Atmosféricas (NCAR), la Administración Nacional de la Atmósfera y el Océano (NOAA), el Departamento de Defensa (DoD) y varias universidades de los Estados Unidos. WRF permite a los investigadores producir simulaciones con datos reales (tomados a partir de una red de estaciones meteorológicas), o con datos simulados.

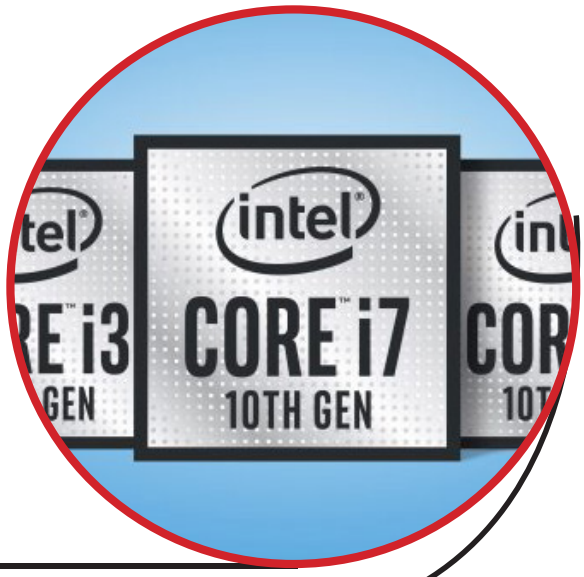
Los especialistas del área de I+D de LUFAC realizaron simulaciones en el dominio CONUS (12 km CONUS Benchmark), que es un dominio de 12 km de resolución horizontal para la parte continental de los Estados Unidos (Continental USA), con una rejilla de 425x300 con 35 niveles verticales. Las simulaciones se realizaron para un período de 48 hrs con datos del 24 de octubre del 2001. También se realizaron simulaciones para el dominio SISMEX, generado por los especialistas de LUFAC. Este dominio tiene una resolución horizontal de 27 km, con una rejilla de 126X86 con 40 niveles verticales.

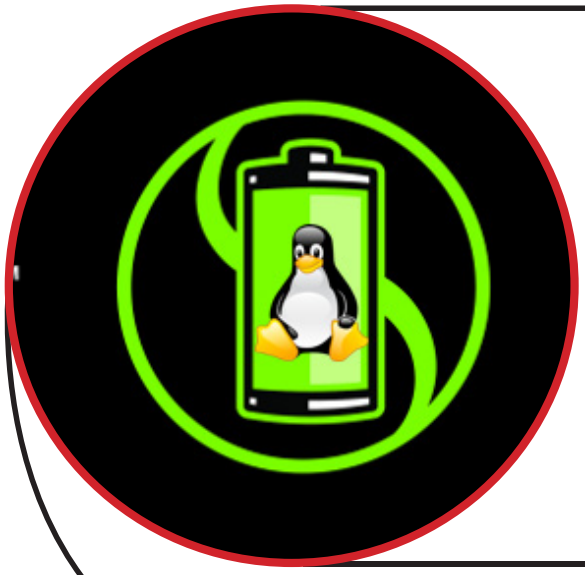
Las corridas del modelo se realizaron en diferentes plataformas con el procesador E5-26XXV4 (12 cores), y los Intel® Xeon® Scalable Processors (codename Skylake) Skylake Platinum 8256 (4 cores), Gold 5120 (14 cores) y Gold 6140 (18 cores). Para el dominio CONUS, los tiempos de simulación fueron de 56.35, 67.75, 105.78 y 192.5 seg para los procesadores Skylake Gold 6140, Gold 5120, Platinum 8256 y E5-26XXV4. Para el dominio SISMEX, los tiempos de simulación fueron de 115.87, 145.04, 209.4 y 379.77 seg respectivamente

Hay que resaltar, que aunque en términos absolutos los tiempos de simulación para el procesador Skylake Platinum 8256 fueron mayores que para los procesadores Intel® Xeon® Gold 6140 y el Intel® Xeon® Gold 5120, la eficiencia fue mayor en este caso por tener este procesador un menor número de cores.

Intel amplia 10ª generación de procesadores móviles Intel Core

Los nuevos procesadores para PCs móviles han sido creados para ofrecer un aumento de rendimiento en cargas de trabajo de múltiples hilos, al tiempo que facilitan diseños para portátiles y sistemas 2-en-1 con más autonomía. La nueva gama también incluye el primer procesador de 6 núcleos de Intel de la serie U, frecuencias de CPU más rápidas, interfaces de memoria más veloces, conectividad Wi-Fi 6 (Gig+) y un alcance más amplio de Thunderbolt. Está previsto que más de 90 diseños adicionales basados en la familia de la 10ª generación de procesadores Intel Core lleguen al mercado a tiempo para las próximas Navidades.





El soporte de NVIDIA Optimus para Linux progresa adecuadamente

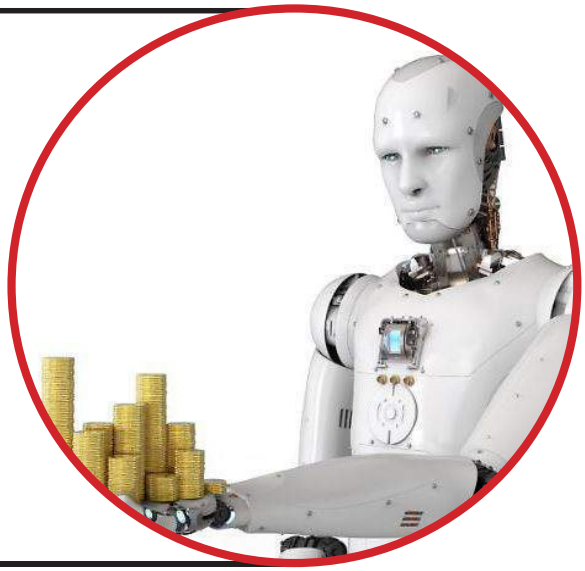
NVIDIA publicó el mes pasado una versión beta de su driver (435.17) que incluía una importante novedad en el soporte de PRIME, la herramienta que permite cambiar manualmente entre las gráficas Intel y NVIDIA en Linux, y es que al parecer se le ha añadido una opción adicional llamada "NVIDIA On-Demand" (NVIDIA bajo demanda), la cual permite que una aplicación específica se ejecute en la GPU de NVIDIA mientras que el resto sigue cargado en el acelerador Intel. Esta característica soporta Vulkan y OpenGL, pero de momento no EGL. Este cambio tendría que hacer que el soporte para portátiles con gráficas Intel+NVIDIA sea más similar al de Windows, sin embargo, todavía quedan importantes pasos por dar, ya que para apoyar la ejecución de una aplicación sobre la GPU NVIDIA se tiene que recurrir a la consola de comandos y a variables del entorno dependiendo de las características de la propia aplicación.

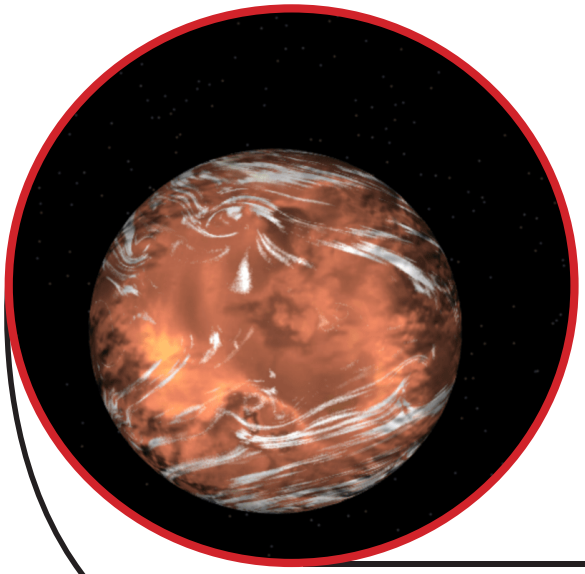
El primer robo con inteligencia artificial de la historia

Mediante un audio sintético se logró imitar la voz del director ejecutivo de una compañía, logrando engañar a un empleado y que transfiriera más de 240,000 dólares a una cuenta fantasma. Según narró el asegurador de la compañía, Euler Hermes. El gerente de la compañía recibió la llamada una noche, donde la voz de su jefe le exigía que transfiriera dinero a una cuenta húngara para ahorrarse multas "multas por pagos tardíos" mientras enviaban los datos financieros por correo electrónico.

"El software era capaz de imitar la voz, y no solo la voz: la entonación, la puntuación, el acento alemán"

Los ladrones, tras lograr conseguir engañar al gerente y conseguir que se hiciera la transacción bancaria, volvieron a llamar para pedir otra transferencia, lo cual levantó sospechas.





Encuentran agua por primera vez en un planeta potencialmente habitable

El planeta K2-18 b, descubierto en 2015, está a unos 110 años luz de la Tierra en la constelación de Leo. Es ocho veces más grande que la Tierra y se encuentra en la zona habitable de su estrella madre, dentro del rango de distancias que podría soportar la existencia de agua líquida en la superficie. El análisis de los datos recogidos por el Hubble y su comparación con diferentes modelos atmosféricos permitió a los científicos descubrir moléculas de vapor de agua y algo de hidrógeno y helio con alto significado estadístico en la atmósfera del K2-18b. Los astrónomos no descartan que la atmósfera también pueda contener metano, nitrógeno y amoniaco, aunque aún no han sido detectados.

China hizo una estrella artificial que podría ser el futuro de la energía sustentable

Una investigación reciente en el Experimental Advanced Superconducting Tokamak (EAST), un reactor de fusión nuclear ubicado en Hefei, China, produjo una estrella artificial que es 6 veces más caliente que el sol, y que podría ser el futuro de la energía sustentable. Este logro en China se une a los pocos experimentos que han logrado llegar a estas condiciones para la fusión nuclear. Los científicos de EAST fueron los últimos en lograrlo, sosteniendo por 10 segundos la fusión nuclear que produjo la estrella artificial, antes de apagarse.

Para leer las notas completas:

Intel amplia 10ª generación de procesadores móviles Intel Core
https://www.globbit.com/intel-amplia-10a-generacion-de-procesadores-moviles-intel-core-19750/

El soporte de NVIDIA Optimus para Linux progresa adecuadamente
https://www.muylinux.com/2019/09/05/nvidia-optimus-avanza-linux/

El primer robo con inteligencia artificlal de la historia
https://marvin.com.mx/primer-robo-inteligencia-artificial-historia/

Encuentran agua por primera vez en un planeta potencialmente habitable
https://mundo.sputniknews.com/espacio/201909121088660095-encuentran-agua-por-primera-vez-en-un-planeta-potencialmente-habitable/

China hizo una estrella artificial que podría ser el futuro de la energía sustentable
https://www.oinkoink.com.mx/noticias/china-estrella-artificial-futuro-energia-sustentable/

LO QUE VENDRA

Arte conceptual de la película *"Blade Runner 2049"* dirigida por por Denis Villeneuve presentada por Columbia Pictures y Warner Bros. Pictures

Autor: Dr. Lester Augusto Alfonso Diaz

Es muy difícil predecir el futuro: el presente que estamos viviendo es muy diferente al futuro que imaginamos. Efectivamente, no hay colonias en la luna, ningún ser humano ha puesto un pie en el Monte Olimpo marciano, no hay miríadas de coches voladores en las grandes ciudades y todavía no hemos fabricado ningún humanoide como los de la célebre película "Blade Runner" de Ridley Scott. Sí, la ciudad de los Ángeles en el año 2019, al menos en lo externo, no se parece mucho a la ciudad lluviosa y supercontaminada de "Blade Runner", y otros filmes de ciencia ficción de finales del siglo XX.

El futuro siempre nos sorprende porque es caótico. Eso ya lo saben los meteorólogos, que aunque hacen maravillas con modelos cada vez más sofisticados y técnicas de asimilación de datos impensables hace una década, saben que tienen una ventana de predictabilidad: nadie puede predecir con exactitud el tiempo meteorológico con un mes de anticipación porque la atmósfera es un sistema caótico. De igual forma el futuro nos sorprendió. Después de la epopeya de Yuri Gagarin y la hazaña del proyecto Apolo pensamos que Marte estaba alcance de la mano. Pero nuevamente nos equivocamos al extrapolar. En el año 1945, al final de la Segunda Guerra Mundial, fueron fabricados los primeros aviones a reacción, poco más de diez años después, en 1957, despegaron los primeros misiles balísticos intercontinentales, el primero hombre voló al espacio en abril de 1961 y ocho después, en julio de 1969, Neil Armstrong dejaba su huella en el Mar de la Tranquilidad

De haber seguido con esta progresión tan escalofriante, hoy en día tendríamos colonias en Marte y mineros extrayendo metales exóticos en Titán, pero no… cincuenta años después del alunizaje estamos tratando de regresar al espacio, de forma lenta y dolorosa, enviando a Marte y a la luna rovers más pequeños que un auto compacto, y con países emergentes como la India y China tomando un papel protagónico.

Despegue de la misión Apolo 11 el 16 de julio de 1969 - NASA

Nuestro error ha sido extrapolar, a veces demasiado alegremente. Hace cincuenta años, imaginamos ciudades con aceras móviles, coches voladores, ascensores que nos llevarían al espacio en un santiamén. En el siglo XX, el automóvil, el cohete y la era del átomo marcaron nuestra imaginación y nos hicieron pensar que la configuración del Siglo XXI estaría marcada por naves de propulsión nuclear y ciudades totalmente mecanizadas. Pero una vez más nos equivocamos. El futuro no se mueve en una línea continua, a veces avanza a saltos de forma impredecible. Aunque las ciudades y los coches del siglo XXI son en muchos aspectos similares a las ciudades del apogeo de la era industrial a mediados del siglo XX, son muy diferentes en algo cuyo impacto estuvimos lejos de calibrar en su momento: es el manejo de la información lo que ha cambiado el mundo en que vivimos. Incluso visionarios como Isaac Asimov, autor de novelas mundialmente famosas como "Yo Robot" y el "Sol desnudo", no pudieron predecir la velocidad del cambio en esta dirección. En algunas de sus novelas ambientadas en el siglo XXV, las computadoras son armatostes antediluvianos que imprimen sus resultados en plotters dignos de vivir en un museo.

Las computadoras de a bordo del proyecto Apolo tenían menos poder de cómputo que cualquier calculadora utilizada por un estudiante de secundaria en la década de los 90. Los cambios en este ámbito han sido tan rápidos que han sorprendido a generaciones como los Baby Boomers y la Generación X. La ley de Moore (aproximadamente cada dos años se duplica el número de transistores en un procesador) marca el espíritu de esta época reciente. Hemos vivido inmersos en una revolución casi sin darnos cuenta, y ahora al levantar la cabeza y analizar los últimos treinta años, nos damos cuenta de la magnitud de los cambios. No fueron en la dirección predicha, pero fueron grandes cambios. Para una persona de la Generación X (como es mi caso), presenciar la desaparición de tecnologías y oficios tradicionales ha sido un viaje sin precedentes, pero lo mejor está aún por venir. Sin duda alguna el siglo XX fue un siglo de excesos: Pensemos en las dos guerras mundiales con sus increíbles costos en vidas humanas y recursos materiales. Sin embargo, echando un vistazo desde las alturas del siglo XXI, podemos vislumbrar las consecuencias de posibles errores que duran ya más de 100 años. Por ejemplo, el automóvil con motor de combustión interna. A estas alturas, viendo ya las consecuencias devastadoras del calentamiento global, la extinción masiva de especies y otros efectos colaterales después de un siglo de crecimiento industrial desenfrenado, nos preguntamos si las cosas podrían haber sido diferentes. En los albores del siglo XX, por ejemplo, la humanidad eligió el automóvil de combustión interna aunque había (aún en aquellos tiempos) otras alternativas como el automóvil eléctrico, por ejemplo[1].

> "HACE CINCUENTA AÑOS, IMAGINAMOS CIUDADES CON ACERAS MÓVILES, COCHES VOLADORES, ASCENSORES QUE NOS LLEVARÍAN AL ESPACIO EN UN SANTIAMÉN"

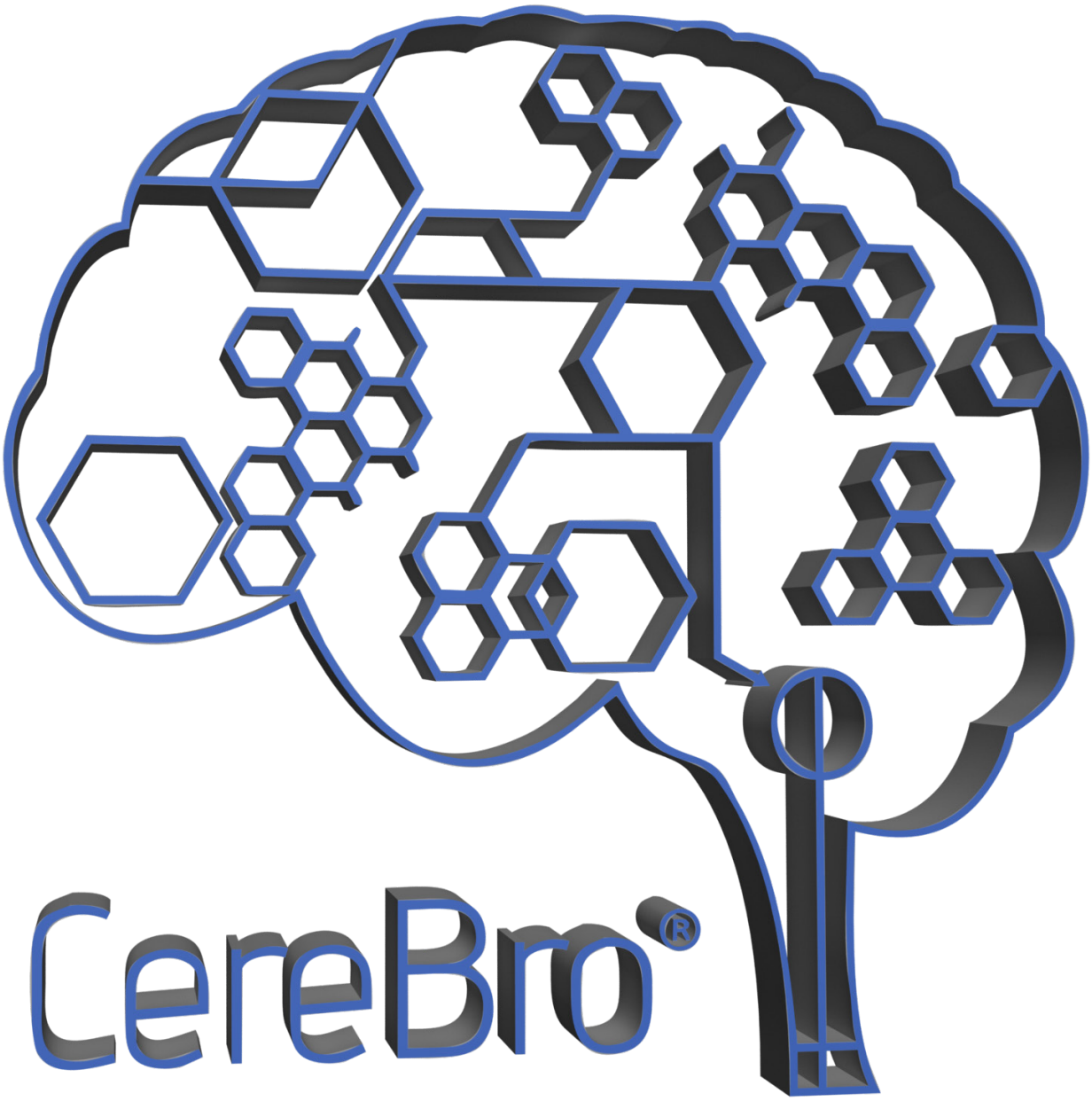
No sabemos si el automóvil, tal como lo conocemos, será visto como un accidente de la historia, un episodio que nunca debió haber ocurrido por sus consecuencias medioambientales y por la dependencia en cuanto a infraestructura y otros recursos valiosos para la humanidad. Posiblemente seamos vistos como esclavos del automóvil en los libros de historia del futuro. ¿Nos prepara la historia otro de sus giros caprichosos? Si, vivimos inmersos en una revolución sin precedentes y casi no nos damos cuenta. Si bien el internet empezó casi de forma clandestina con el lanzamiento de ARPANET en 1969, y el cambio fue vertiginoso después del desarrollo de la World Wide Web por Tim Berners Lee, hoy la inteligencia artificial (AI) está generando cambios tan profundos que afectan la cotidianeidad, y los responsables de la incorporación de muchos de estos avances en la vida cotidiana son gigantescas empresas de tecnología (Amazon, Microsoft, Apple, Facebook y Alphabet Inc, la empresa matriz de Google) que tienen miles de millones de clientes, algo impensable hace treinta años. Estas empresas son tan gigantescas que su valor de mercado es mayor que el PIB de muchos países en el G20. En julio de este año, Amazon y Microsoft tenían un valor de mercado superior al millón de millones de dólares. Aquí se plantea un posible giro interesante de la historia. Ya sabemos que el futuro muchas veces no será como lo imaginamos. Estas empresas están presentes en nuestras vidas cotidianas de una forma que ni George Orwell en su novela "1984" hubiera imaginado. Los países totalitarios, con sus tecnologías antediluvianas, no tenían acceso total a nuestras vidas, estas empresas sí. Gracias a sus herramientas de inteligencia artificial conocen todos nuestros hábitos, las rutas que tomamos para ir al trabajo. Guardan en la nube nuestras fotos, nuestros videos, conocen nuestras preferencias de compra. De muchas formas nos han hecho la vida cómoda y lo disfrutamos, pero tienen el control de muchos aspectos de nuestras vidas. Actualmente, además de entes físicos, somos parte de la nube, viviendo en discos duros de las granjas de cientos de miles de servidores de Google y Amazon. Finalmente no sabremos que giro dará la historia en los próximos veinte años, pero casi podemos asegurar que la inteligencia artificial será uno de los protagonistas en los cambios que se avecinan. ¿Se dará finalmente la simbiosis hombre máquina?, ¿Seremos capaces de encontrar solución a los retos del calentamiento global?, ¿vamos camino a la singularidad, en un mundo dominado por la inteligencia artificial? No lo sabemos, porque al igual que los meteorólogos, solo tenemos una pequeña ventana de predictabilidad, pero el futuro que se avecina está lleno de posibilidades.

Notas del lector

Notas del lector

CereBro

La primera supercomputadora 100% Mexicana



LUFAC®

¿TE GUSTARIA QUE DIVULGARAMOS TU ARTICULO EN NUESTRO SIGUIENTE NUMERO?

Envianos un correo a nuestra dirección y puedes formar parte de nuestro equipo de colaboradores

revistasiglo21@lufac.com

BY

Editorial
Savona 30
Colonia Fraccionamiento
Residencial Acoxpa
C.P.14300
CDMX
email: revistasiglo21@lufac.com