

Aplicación del Modelo de Vidrio de Espín en la Caracterización de Ecosistemas

Objetivo del proyecto

En el marco del proyecto EuroCC, se abre la convocatoria para el acceso de empresas y administraciones públicas españolas a recursos de computación de altas prestaciones (HPC, por sus siglas en inglés). El uso de estos recursos estará destinado a la realización de actividades de I+D+i, tales como pruebas de concepto, ensayos de escalabilidad, proyectos piloto o evaluación de aplicaciones informáticas, entre otras.

De esta manera, COMPUCUANTICA S.L. pretende aprovechar la capacidad computacional de Caléndula para aplicar el modelo de vidrio de espín (MVE) en el contexto de la ecología y medioambiente. Este enfoque pretende aprovechar el potencial del MVE para configurar la dinámica, la estabilidad y la resiliencia de ecosistemas. Tanto el MVE como su analogía de sistema medioambiental poseen una complejidad (gran número de variables e interacciones, múltiples especies, relaciones de depredación, competencia, mutualismo, etc.) que necesita de una solución computacional de alto rendimiento como la que ofrece SCAYLE.

Participantes del proyecto

COMPUCUANTICA S.L.

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), www.scayle.es

Ejecución: 2024.

Financiación del proyecto

El proyecto europeo EuroCC se encuentra financiado por la Empresa Conjunta Europea de Computación de Alto Rendimiento (JU) (European High-Performance Computing Joint Undertaking-EuroHPC-JU) en virtud del acuerdo de subvención n.º 951732. La JU recibe apoyo del programa de investigación e innovación Horizonte 2020 de la Unión Europea y sus países asociados.

Funciones de SCAYLE

La utilización de Caléndula para resolver algoritmos asociados al MVE está plenamente justificada por la complejidad intrínseca de estos sistemas y los desafíos computacionales que presentan. El MVE involucra sistemas que interactúan de manera compleja y no lineal, y que poseen un gran número de grados de libertad. Explorar el espacio energético para encontrar configuraciones de equilibrio o estados de mínima energía requiere un poder computacional significativo, especialmente a medida que el tamaño del sistema aumenta.

Los problemas asociados a los vidrios de espín, como el cálculo de las configuraciones de equilibrio asociadas a ciertos ecosistemas, pertenecen a la clase de problemas NP-complejos. Esto significa que el tiempo necesario para resolverlos crecerá exponencialmente con el tamaño del sistema. Esto es especialmente crítico puesto que, para capturar apropiadamente las interacciones emergentes en vidrios de espín asociadas a la biodiversidad, es necesario simular sistemas de gran tamaño.

Caléndula permitirá realizar simulaciones de alta resolución que se encuentran fuera del alcance de ejecución en equipos tradicionales, proporcionando resultados más precisos y estadísticamente significativos. A partir de su arquitectura paralela, permitirá dividir tareas computacionalmente intensas como las simulaciones Monte Carlo y permitir una exploración más rápida del espacio de estados. Esto reduce significativamente el tiempo requerido para obtener resultados, haciéndolos viables en plazos razonables.



EuroHPC
Joint Undertaking

Grant Agreement No 951 740

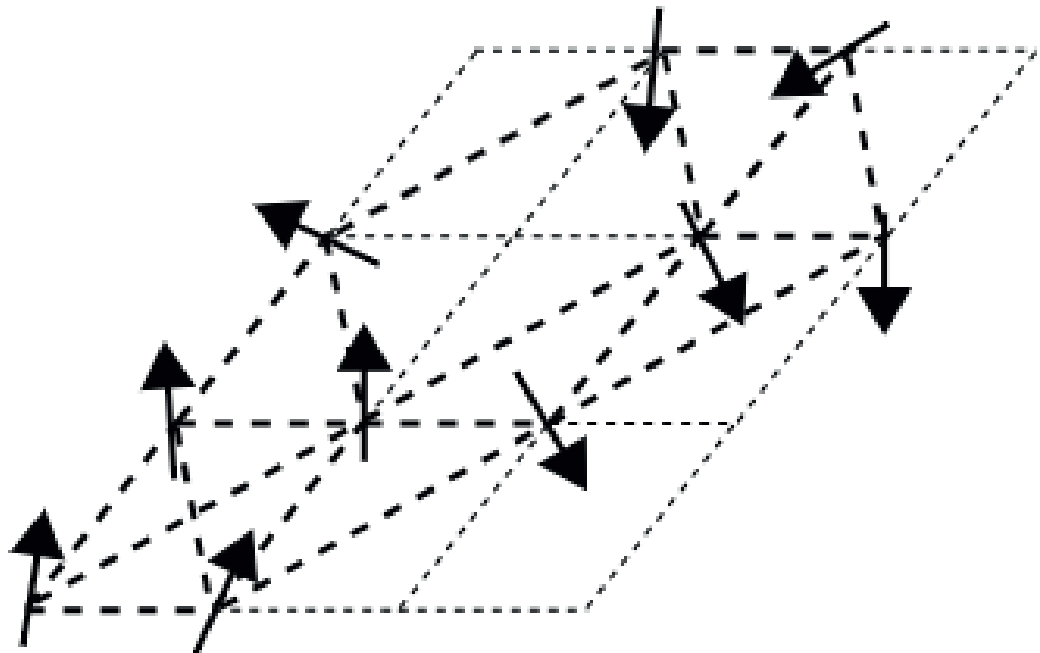
Justificación del proyecto

Las aplicaciones del modelo de vidrio de espín en el contexto que nos ocupa son diversas. En esta actividad se propone explorar la estabilidad de ecosistemas frente a perturbaciones y, en base al peso de las interacciones que aparecen en su seno, la relación entre los procesos estocásticos y determinísticos, y cómo la diversidad y variabilidad están conectados con éstos, o la aparición de la dinámica del caos y ciclos periódicos presentes en ecosistemas reales. Además, este enfoque puede contribuir a la conservación de la biodiversidad al proporcionar información sobre cómo se ven afectados los ecosistemas por el cambio climático, la pérdida de hábitat y otras amenazas.

La actividad EcoSpin pretende abordar el problema del estudio de ecosistemas y de la medida de la biodiversidad (de la que se prevé una demanda creciente como valor más realista que la mera medida de la huella de carbono) desde la perspectiva novedosa del MVE, una herramienta que se está mostrando muy eficaz para explicar sistemas físicos complejos. Mediante el uso de Caléndula, se pretenden abordar estas cuestiones de una manera rápida, eficaz, estructurada y eficiente.

Líder del proyecto

COMPUCUANTICA es una empresa joven, creada en 2022, especializada en la aplicación de nuevas tecnologías al análisis de datos. Pese a su corta vida, cuenta con experiencia en el análisis de datos sanitarios y agrícolas, colaborando con empresas en la predicción de cosechas y con la **FUNDACIÓN PÚBLICA ANDALUZA PARA LA GESTIÓN DE LA INVESTIGACIÓN EN SALUD DE SEVILLA (FISEVI)** en la aplicación de IA a la Determinación del Riesgo de Ictus y en el Análisis de la Silicosis en el Sistema Sanitario Público de Andalucía. Desde sus inicios invierte en investigación y desarrollo de nuevos modelos.



Representación esquemática de la distribución aleatoria de espines en un vidrio de espín, aproximación utilizada en estudios de biodiversidad para describir la variabilidad y estabilidad de los ecosistemas