

Mujeres y matemáticas: "Matemática contemporánea por matemáticas contemporáneas, Elena Akhmatskaya"

Desde la RSME queremos visibilizar el papel de las mujeres en las matemáticas. Para ello, y aprovechando la celebración del Día de la Mujer Trabajadora, vamos a difundir semanalmente el perfil de una mujer matemática en el Boletín de la RSME. Estos perfiles han sido elegidos para una exposición, coordinada por Rosa María Pardo San Gil del departamento de Matemática Aplicada de la Universidad Complutense de Madrid, que se exhibirá en las facultades de las bibliotecas de todas las facultades españolas que cuenten con estudios de matemáticas, y queremos colaborar con su difusión.

Elena Akhmatskaya Profesora Ikerbasque, líder del Modelling and Simulation in Life and Materials Sciences Group (MSLMS) en el Basque Center for Applied Mathematics (BCAM) de Bilbao. Es una matemática aplicada que trabaja en el desarrollo de nuevos algoritmos para simulaciones cuánticas, atómicas, mesoscópicas y multiescala; su implementación, y las aplicaciones en la investigación puntera en las ciencias de la vida y la tierra usando computadores de alto rendimiento. Tiene más de veinte años de experiencia académica en Estados Unidos (Cornell University), Reino Unido (University of Manchester, Imperial College London), España (BCAM) y los países del este de Europa, y trece años de experiencia en la industria (Fujitsu Research Labs, Reino Unido, como investigadora principal). Es autora o coautora de más de ochenta artículos, incluyendo uno con más de 1420 citas desde el 2000, en revistas científicas de primera clase; ocho patentes (Europa, Reino Unido y Estados Unidos); más de sesenta informes confidenciales con la industria; tres paquetes de software comercial, y cuatro paquetes de software libre. Sus intereses de investigación se centran en el desarrollo de nuevos métodos de muestreo combinando métodos de cadenas de Markov Monte Carlo con dinámicas hamiltonianas. Los métodos (algunos de ellos patentados) pretenden superar las deficiencias de las técnicas de muestreo convencionales. Con los investigadores de su equipo, trabaja en la extensión de los métodos a distintas escalas de simulación y colectividades estadísticas, así como a una mejora adicional de su eficiencia, introduciendo nuevos esquemas adaptativos, integradores numéricos y algoritmos paralelos. Las metodologías desarrolladas se implementan en los paquetes de software de simulaciones internas altamente paralelizadas, permitiendo la simulación de sistemas de grandes dimensiones y sucesos raros en escalas cuántica, atómica, mesoscópica y múltiple, así como para estimación paramétrica en estadística bayesiana. Artículos:

- Akhmatskaya E, Fernández-Pendás M., Radivojevic T., Sanz-Serna J.M. “Adaptive splitting integrators for enhancing sampling efficiency of modified Hamiltonian Monte Carlo methods in molecular simulation”. Langmuir, 33 (43) (2017) 11530-11542.
- Akhmatskaya E., Asua J.M. “Dynamic modeling of the morphology of latex particles with in situ formation of graft copolymer”. Journal of Polymer Science – A 50 (7) (2012) 1383-1393.
- Akhmatskaya E., Reich S. “GSHMC: An Efficient Method for Molecular Simulation”. Journal of Computational Physics 227 (2008) 4934 – 4954.