

ARTÍCULO

SUPERCÓMPUTO: APLICACIONES Y RETOS EN LA ERA DIGITAL

José Luis Gordillo Ruiz

Supercómputo: aplicaciones y retos en la era digital

A la memoria de Aaron Swartz

Por ayudarnos a buscar un mundo mejor

Resumen

A través de los años, desde el comienzo de la masificación de las computadoras y del uso de la internet, hemos visto una asombrosa evolución de sus aplicaciones -tanto el software como sus propósitos-, aunque este asombro se mitiga por la cotidianidad del uso de estas tecnologías. Existe un área de aplicaciones de cómputo que también ha visto una evolución asombrosa, aunque no es tan conocida: el supercómputo. Con el incremento de las capacidades de las supercomputadoras, los científicos pueden estudiar con mayor detalle y precisión muchos fenómenos, lo cual tiene un impacto -directo o indirecto- en nuestro entendimiento del universo y en la forma en que vivimos. La evolución de las aplicaciones, tanto las cotidianas como las de supercómputo, se fundamenta en un incremento constante en las capacidades de las tecnologías digitales. Si el incremento de las capacidades se mantiene, las aplicaciones seguirán evolucionando, llevándonos a escenarios que hoy pueden parecer posibles solamente en la ficción. Como es de esperarse, estos beneficios no son gratuitos, y hoy en día, para mantener el avance de las tecnologías, existen varias preguntas sin respuesta. Por otro lado, en México, el supercómputo es un área que no se ha dejado de lado. Aunque con altibajos, algunas universidades hacen esfuerzos por aprovechar estas herramientas, fundamentales hoy en día.

Palabras clave: Supercómputo; aplicaciones; rendimiento; energía; programación paralela.

Supercomputing: applications and challenges in the digital age

Abstract

Electronic portfolio as a formative assessment tool, although it can be prepared and deposited Computing and internet applications have evolved in amazing ways through the years. People are used to seeing this evolution in desktops, laptops and smartphones. There is another application area where changes have also been dramatic: supercomputing. As the supercomputers capabilities increase, scientists are allowed to study diverse phenomena with more detail and precision. The

basis of all of these changes is the constant increment of the performance of digital technologies. If this constant increment endures, it would be possible in the near future to have applications that today belong to science fiction. Nowadays, there are several challenges to sustain the increase in performance. We discuss some of them. On the other hand, several universities in Mexico are working together to take advantage of supercomputing technologies. We present some of these efforts.

Keywords: Supercomputing; computing applications; performance; energy consumption; parallel computing.

Los avances de las tecnologías digitales

Los avances en las tecnologías de cómputo y comunicaciones digitales son paulatinos, pero constantes. Año con año podemos observar o utilizar mejor software, mejores dispositivos. De este modo, si volteamos varios años hacia atrás, podemos ver cambios cualitativos que asombran. Hace unos 15 años, preferíamos no visitar páginas con archivos *jpeg*, pues el tiempo de descarga usando los antiguos *modems* de 56 kbps era demasiado largo, mientras que hoy podemos descargar de una tienda electrónica una película completa en alta definición en unos cuantos minutos. También podemos descargar (y navegar) vistas “tridimensionales” de casi cualquier ciudad del mundo, mediante una red y un dispositivo móviles. De manera similar, hace 10 años muchos algoritmos de minería de datos, sistemas expertos y procesamiento de lenguaje natural eran impracticables. Hoy tenemos una computadora que es campeona de un concurso de conocimientos, y los teléfonos móviles pueden reconocer comandos de voz.



La supercomputadora Watson, de IBM, en el concurso *Jeopardy*

La mayoría de los ejemplos anteriores son ejemplos de los cambios que podemos notar inmediatamente, pues provienen de dispositivos y software con los que mantenemos una convivencia cotidiana. Pero la tecnología ha tenido efectos igualmente notables en otro tipo de aplicaciones. Aplicaciones que indirectamente también han cambiado muchos aspectos de nuestra vida: las de investigación científica y tecnológica que se llevan a cabo gracias a la existencia de las supercomputadoras.

Los avances en Supercómputo

Las aplicaciones de supercómputo cubren una gama muy amplia: desde preguntas básicas sobre la estructura del universo y el comportamiento de los átomos, hasta cuestiones muy prácticas como el diseño de fármacos o de la aerodinámica de los aviones. ¿Cómo han cambiado estas aplicaciones? Hace 20 años se simulaban los movimientos de galaxias involucrando “solamente” 9 millones de partículas, mientras que en la actualidad se pueden involucrar varios miles de millones de partículas. Este incremento proporciona más información sobre la forma en que el universo ha evolucionado. Así mismo, 10 años atrás sólo era posible involucrar unas cuantas decenas de átomos en cálculos cuánticos, mientras que hoy existen simulaciones con decenas de miles de átomos, lo cual permite avanzar en los conocimientos necesarios para crear nuevos materiales, desarrollar nanotecnología y comprender mejor el comportamiento de moléculas biológicas, como proteínas y virus. La genética es otra área que se ha visto fuertemente influida por el avance tecnológico en computación y comunicaciones: apenas en los años 90 fue posible mapear el genoma humano, mientras que ahora se construyen mapas filogenéticos a partir del análisis de cientos de miles de secuencias genómicas. Finalmente, investigaciones de gran envergadura, como la búsqueda del bosón de Higgs, la detección de ondas gravitacionales o el estudio de cáncer de mama serían impensables sin las capacidades actuales en procesamiento de señales, almacenamiento y análisis de datos y comunicaciones a nivel global.

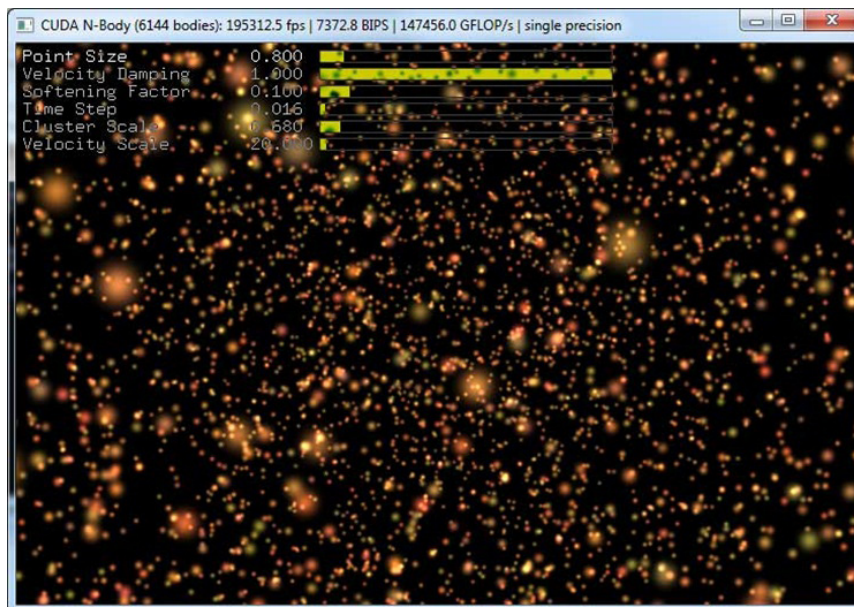
Y sin embargo, aún existen problemas/modelos/escenarios que no pueden ser estudiados con las tecnologías actuales, pues requieren capacidades miles de veces mayores. Para estas aplicaciones, y otras que sin duda alguna surgirán, es necesario continuar con los esfuerzos para mantener el incremento constante de las capacidades de las tecnologías.

Estos avances no son gratuitos, y deben entenderse los retos que implican.

Retos globales

Durante los primeros 40 años de la computación electrónica, la forma de construir máquinas más rápidas se basó en la construcción de procesadores más rápidos. A mediados de la década de los 90, los investigadores y fabricantes de supercomputadoras consolidaron conceptos, técnicas y tecnologías que resultaron en una forma más sencilla y barata para construir máquinas más

potentes; agregando más procesadores a una misma máquina. Durante 10 años ambas estrategias convivieron, lo que produjo que los procesadores pasaran de velocidades de 100 MHz a 3,300 MHz, mientras que las máquinas paralelas pasaron de tener unos cuantos miles de procesadores a tener más de 100 mil.



Simulación de N-Cuerpos en una tarjeta gráfica NVIDIA

A mediados de la década pasada, la industria de la computación se encontró con un problema: ya es demasiado costoso construir procesadores más rápidos. Por ahora, el único camino que queda es construir computadoras con más procesadores. Es por esto que las supercomputadoras actuales tienen más de un millón de procesadores, mientras que los equipos caseros -e incluso algunos dispositivos móviles- tienen 4, 8 o 16 procesadores en vez de uno. De hecho, los fabricantes de procesadores se encuentran creando dispositivos “coprocesadores” que contienen hasta 50 unidades de procesamiento. Del mismo modo, las tarjetas gráficas de alto desempeño -que también pueden usarse para cálculos numéricos-, poseen varios cientos de unidades de procesamiento. Este cambio obligado de estrategia conlleva un cambio semántico al que muchas veces no se le presta la atención necesaria: las computadoras ya no hacen operaciones más rápido, sino que hacen más operaciones por unidad de tiempo.

Todo lo anterior tiene consecuencias en el tipo de software que se puede desarrollar para supercomputadoras, pues si bien hacer un programa que utilice unas cuantas decenas de procesadores no es tan complejo, si lo es un programa que utilice varias decenas de miles de procesadores. Algo similar puede decirse sobre aplicaciones más cotidianas, que son utilizadas en las computadoras de escritorio. Es por esto que en los últimos años no se han visto avances tan notables en el rendimiento de los equipos de escritorio, que ya están en el límite de rendimiento por procesador, y el software que se utiliza es difícil de paralelizar. La industria se ha enfocado más en

hacer equipos más ligeros y que consumen menos energía, así como en incrementar el rendimiento en dispositivos móviles, donde todavía hay espacio para crecer.

Por otro lado, la estrategia de aumentar la capacidad de las supercomputadoras mediante la adición de más procesadores tiene otras consecuencias: las máquinas se hacen más complejas, lo que incrementa las posibilidades de falla. A su vez, requieren más espacio físico, y más energía para operar.

El de la energía es uno de los grandes retos en la construcción de nuevas supercomputadoras. El Dr. Mateo Valero, quien es director del Centro de Supercómputo de Barcelona, y un destacado arquitecto de computadoras, ha señalado que la única forma de hacer factible la construcción de supercomputadoras más poderosas es reducir en dos órdenes de magnitud la cantidad de energía que éstas requieren. Por ejemplo, las proyecciones indican que hacia principios de la siguiente década debe haber supercomputadoras capaces de hacer un trillón de operaciones por segundo (Exaflops). Las tecnologías actuales más eficientes proporcionan 2 mil millones de operaciones por segundo (Gigaflops) por cada watt. Con estos números, una supercomputadora del año 2020 requeriría 500 Megawatts, que es más o menos lo que genera una central nucleoelectrónica. El reto es reducir este consumo a 20 Megawatts, lo que implica crear tecnologías que sean más de 200 veces más eficientes que las actuales. Es como buscar que la batería de un *smartphone* dure un año completo con una sola carga.

Estos son algunos de los retos y dificultades que las tecnologías de supercómputo enfrentarán en los próximos años, a nivel global. En México, ¿qué estamos haciendo para darnos las tecnologías computacionales adecuadas para afrontar nuestros retos científicos y tecnológicos? ¿Qué problemas enfrentaremos en los próximos años para desarrollar y aprovechar las tecnologías digitales asociadas a la investigación?



La supercomputadora *sequoia*, una de las más poderosas de la actualidad.

Retos para México

México no ha tenido una participación constante en el ámbito del supercómputo. Desde que se publica la lista Top500 Supercomputing Sites (las 500 supercomputadoras más rápidas del mundo), solamente ocho computadoras instaladas en centros académicos en México han sido incluidas, para un total de 18 apariciones. Estas computadoras aparecieron en las listas entre los años 1993 a 1997 y 2004 a 2009. El porcentaje de participación es bajo: aproximadamente 3,000 computadoras han estado en las listas del Top500, para un total de 18,000 apariciones.

En México se rompió la barrera de los Gigaflops cinco años después de haberse logrado este hecho a nivel internacional. La barrera del billón de operaciones por segundo (Teraflops) se rompió en 1998 a nivel mundial, pero fue hasta ocho años después cuando una institución académica mexicana pudo contar con una computadora con un rendimiento de esta escala. Más de 30 países diferentes tuvieron computadoras con rendimientos superiores al Teraflop antes de que esto sucediera en México.

Otra forma de cuantificar el rezago mexicano en supercómputo es señalando cuántos años pasan para tener una máquina con capacidad equivalente a un Top1. Por ejemplo, la computadora que ocupó el primer lugar en el primer Top500 (junio de 1993) tuvo un rendimiento de 59.7 Gigaflops. Nunca hubo una computadora en un sitio académico mexicano que rebasara ese rendimiento y estuviera en el Top500. La computadora que ocupó el primer lugar en el Top500 de 2001 tuvo un rendimiento de 7.226 Teraflops. La primera computadora en México en alcanzar los 7 Teraflops fue KanBalam en 2006, ocupando el puesto 126.

En los últimos años, diversas instituciones en México han buscado, y están buscando, cerrar el rezago del país en materia de supercómputo. En particular, el CINVESTAV, la UAM y la UNAM han hecho esfuerzos para instalar supercomputadoras en 2006, 2008 y 2010, respectivamente. Estas instituciones están trabajando en conjunto, mediante el proyecto conocido como “Laboratorio Nacional de Supercómputo”, para cumplir con dos objetivos muy precisos:

- Mantener constantemente en México al menos un equipo de supercómputo en el Top150.
- Romper la barrera de los mil billones de operaciones por segundo (Petaflops) en 2015.

Los cuales buscan que no pasen más de cinco años para ofrecer a los investigadores del país recursos computacionales competitivos a nivel internacional, además de mantener a México entre los 15 países con mejor infraestructura de supercómputo en el mundo.

Los esfuerzos para alcanzar estos objetivos ya se han iniciado. En el transcurso del primer trimestre del año, la UNAM pondrá en marcha un nuevo equipo de supercómputo. Este equipo

tendrá una capacidad teórica de 110 Teraflops, y se compondrá de 5,300 procesadores, 16 GPUs, cerca de 15 Terabytes de memoria RAM y más de 750 Terabytes de almacenamiento en disco.

Al igual que sus antecesoras, la nueva supercomputadora de la UNAM será utilizada en proyectos de diferentes áreas del conocimiento que se cultivan en México, principalmente en ciencias de materiales y nanotecnología, astrofísica, bioquímica y biofísica, sismología y física de partículas, entre otras.



La supercomputadora KanBalam, primera en la UNAM con una capacidad de 7 Teraflops.

Conclusiones

Los avances en las tecnologías digitales de cómputo y comunicaciones han permitido una gran evolución en las aplicaciones de dichas tecnologías a la investigación científica y tecnológica, pero aún hay un camino que recorrer para resolver problemas de gran relevancia. Las estrategias actuales para incrementar las capacidades de las supercomputadoras plantean grandes retos para el futuro, principalmente en cuanto a la energía que estos equipos requerirán, y a la forma en que son programadas. En México, el CINVESTAV, la UAM y la UNAM están llevando a cabo esfuerzos conjuntos para cerrar el rezago del país en el ámbito del supercómputo.

Referencias

1. IBM. IBM Watson: Ushering in a new era of computing [en línea]: *Watson*. <<http://www-03.ibm.com/innovation/us/watson/>> [Consulta: 6 de febrero de 2013]
2. HAMADA, Tsuyoshi, et al. *42 TFlops hierarchical N-body simulations on GPUs with applications in both astrophysics and turbulence*. SC 09, Proceedings of the Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis.

3. Association for Computing Machinery. Awards [en línea]: *Gordon Bell Prize – 2012*. <<http://awards.acm.org/homepage.cfm?awd=160>> [Consulta: 6 de febrero de 2013]
4. HASEGAWA, Yukihiro, et al. *First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer*. SC 11, Proceedings of the Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis.
5. GRAHAM, Rex. SDSC's CIPRES Science Gateway Clarifies Branches in Evolution's 'Tree of Life'. UC San Diego, University Communications and Public Affairs. [en línea] Julio 03 de 2012. <http://ucsdnews.ucsd.edu/archives/date/030712> [consulta: 7 de febrero de 2013]
6. SHAW, David E. et al. *Millisecond-scale molecular dynamics simulations on Anton*. SC 09, Proceedings of the Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis.
7. CERN. Accelerating science [en línea]: Worldwide LHC Computing Grid. <<http://wlcg.web.cern.ch/>> [Consulta: 7 de febrero de 2013]
8. AMEDOLIA, S. Roberto, et al. MammoGrid: Large-Scale Distributed mammogram Analysis. [en línea]: <<http://arxiv.org/pdf/cs/0402006.pdf>> [Consulta: 7 de febrero de 2013]
9. The Future of Supercomputing: An Interim Report. National Academies Press. Sep 1, 2003.
10. Universidad Autónoma Metropolitana. División de Ciencias Básicas e Ingeniería. [en línea]: Laboratorio de Supercómputo y Visualización en Paralelo. <<http://supercomputo.izt.uam.mx/>> [Consulta: 7 de febrero de 2013]
11. Cluster Híbrido de Supercómputo – Xihuatlan. Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (Cinvestav). <<http://clusterhibrido.cinvestav.mx/>>