

**A** mitjan anys 70, Gordon Moore, un enginyer de circuits integrats, va predir que cada dos anys es podria doblar el nombre de transistors integrats en un xip. La llei de Moore s'ha anat complint amb gran precisió, un fet que ha suposat que en els últims trenta anys, cada dècada s'hagi multiplicat per mil la velocitat de la computació. A la pràctica, això vol dir que els mòbils més avançats d'avui dia tenen una capacitat equivalent a la que tenia el superordinador més potent de fa uns vint anys. Si el procés segueix al mateix ritme, d'aquí a vint anys els nostres dispositius personals tindran la capacitat dels superordinadors d'avui dia, capaços de fer càlculs, per exemple, de l'evolució del canvi climàtic.

Els superordinadors serveixen per executar programes que requereixen un gran nombre de càlculs o que mouen una gran quantitat de dades. Estan formats per milers d'ordinadors connectats que treballen conjuntament en la resolució d'un problema. Aquest mètode, conegut com a computació paral·lela, divideix el problema en moltes parts perquè hi puguin treballar molts processadors a l'hora. A més, també tenen la capacitat d'emmagatzemar una gran quantitat de dades, i esdevenir imprescindibles en un món que cada cop generarà més Big Data.

La supercomputació es considera "el tercer pilar de la ciència" perquè dona un suport inestimable a la pota teòrica i experimental accelerant investigacions que trigarien molt més temps a fer-se o que fins i tot serien impossibles –no es pot, per exemple, fer un experiment real per veure què passaria si es trenquessin els murs d'un cementiri nuclear.

El Marenostrum, emblema del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS), és el superordinador més potent de l'Estat espanyol i un dels més potents d'Europa. Ara ocupa el lloc 106 al Top 500 del món, però el BSC vol avançar més posicions amb la implementació del Marenostrum 4, que ja té autorització i finançament i que serà desenvolupat per l'empresa que guanyi el concurs.

El Marenostrum 3 –amb vora 50.000 processadors– i altres màquines del BSC donen servei a investigadors europeus així com als més de quatre-cents investigadors del centre, on també es fa recerca en el camp de la supercomputació.



## El tercer pilar de la ciència

No hi ha cap altre camp de la ciència que avanci a la velocitat de les tecnologies de la informació. Els supercomputadors, capaços de processar i emmagatzemar quantitats ingents de dades, són la màxima expressió d'aquesta evolució galopant, que ahora accelera el progrés de la resta de disciplines científiques. A Catalunya tenim un dels superordinadors més potents d'Europa, el MareNostrum. El gestiona el BSC, que, a banda d'oferir els serveis d'aquesta infraestructura, compta amb més de 400 investigadors.

*Reportatge d'Àstrid Bierge*





El Marenostrum 3, amb prop de 50.000 processadors i 1,1 petaflops, és un dels ordinadors més potents d'Europa. Ja és obert el concurs per fabricar-ne la propera versió, que aproximadament en multiplicarà per deu la capacitat computacional.

## Cap als divuit zeros

Els superordinadors actuals se situen a l'escala dels petaflops. Això vol dir que poden fer un mínim de mil bilions d'operacions aritmètiques bàsiques cada segon. És una xifra de 15 zeros! El Marenostrum 3 té una capacitat d'1,1 petaflops i l'ordinador més potent del món, el xinès Sunway TaihuLight, té un rendiment màxim de 93. És una barbaritat, però això no s'atura. Els Estats Units, Japó, la Xina i a remolc la UE ja s'estan preparant per fer el salt, en els propers anys, de la petascale a l'exascale. Un exaflop són 1.000 petaflops, i per tant l'exascale incrementarà en tres zeros el nombre de càlculs per segon que podran fer les màquines, de manera que es podran resoldre els problemes més complexos a molta més velocitat.

Al departament de Ciències de la Computació del BSC s'investiga el disseny del maquinari i del programari dels

superordinadors d'ara i, sobretot, dels del futur. És a dir, s'estudia com hauran de ser els xips i els programes informàtics per als computadors que funcionin a l'exascale. A aquest nivell, hi haurà milions de processadors que hauran de connectar-se entre ells per resoldre conjuntament els problemes plantejats, i això implica un gran repte tecnològic. A més, amb tants processadors, augmentarà la probabilitat que alguns fallin, i per tant els programes hauran de ser prou espavilats per fer front a aquest tipus d'entrebancs.

En aquest departament també s'investiguen noves arquitectures computacionals. Cal pensar que fins fa deu o quinze anys, el maquinari dels superordinadors estava fet de peces que només es fabricaven específicament per a aquests computadors reis. Com que era molt car fabricar i renovar els xips per a tan poques màquines, a partir d'un punt es

van començar a fer superordinadors amb peces del maquinari dels PC, fabricades a milions, molt més barates i en constant actualització. Avui dia, però, el mercat produeix més peces per als mòbils i tauletes que per als PC, i per tant els superordinadors del futur podrien estar fets del maquinari d'aquests dispositius. En els últims cinc anys, al BSC s'han fet unes quantes versions d'un projecte pilot que va en aquesta línia i que ha estat pioner. L'últim prototipus, que es diu Mont Blanc i comparteix peixera amb el Marenostrum, és un ordinador fet de xips de *smartphones* Samsung. El BSC, però, anirà abandonant aquesta línia de recerca perquè les empreses ja estan començant a agafar el relleu.

Els processadors dels mòbils podrien ser una oportunitat perquè la UE fes el salt i passés a tenir superordinadors de tecnologia pròpia. Cal pensar que les peces del maquinari estan fetes als Estats Units, com els processadors, per exemple, fabricats quasi tots per INTEL. Per contra, en el terreny dels *smartphones*, els microprocessadors europeus ARM dominen el mercat. Aquest podria ser un bon punt de partida per arribar a competir amb la Xina, el Japó i els Estats Units en la producció pròpia de supercomputadors.

L'arquitectura computacional és, de fet, un dels punts forts del BSC. Mateo Valero, director del centre, va ser el primer catedràtic d'aquest camp a l'estat i va crear escola a la Universitat Politècnica de Catalunya. Es va generar un planter d'unes 700 persones que actualment treballen arreu del món i que tenen un gran prestigi. Aquest reconeixement ha impulsat convenis d'investigació conjunta entre el BSC i empreses com IBM, Intel i Microsoft, que sempre volen estar al dia de les investigacions que es fan al centre. Al BSC ens expliquen que Intel, que va fer el Marenostrum 3, acostuma a enviar els seus nous xips al centre perquè siguin analitzats i valorats pels científics d'aquí.

## Medicina personalitzada

Les simulacions són una de les aplicacions més importants de la supercomputació. Serveixen per estudiar i resoldre problemes complexos que no es podrien fer en la realitat o que trigarien molt més a fer-se. Mitjançant la simulació, per exemple, es poden descobrir nous fàrmacs per combatre una determina-



→ da proteïna. Al BSC tenen una base de dades amb la informació completa de milers de proteïnes per poder descobrir medicaments a través d'aquestes simulacions. El seu programari, PELE, està molt reconegut internacionalment i també serveix per als virus, que muten constantment i per tant són molt diferents d'un pacient a l'altre.

En un futur, segurament seran els ordinadors els qui decideixin quin tipus de fàrmac ha de prendre cada pacient segons els gens del microorganisme responsable de la seva patologia. Bé, i segons els seus propis gens. Fixant la mirada en la medicina personalitzada, la genòmica és l'altra gran línia de recerca del BSC en el camp de les ciències de la vida. El centre ha desenvolupat SMUFIN, un mètode computacional capaç de detectar de forma senzilla, ràpida i precisa les variacions genètiques responsables de l'aparició i progressió de tumors i d'altres malalties genètiques. Això implica l'anàlisi d'una immensa quantitat de dades. Perquè es facin una idea, quan se seqüencia la cadena d'ADN d'un pacient s'obtenen 120.000 milions de lletres repartides en peces de 100 lletres. És a dir, 1.200 milions de peces de 100 lletres. Això són 120 gigabytes d'informació. Cal comparar les dades de diferents pacients que pateixen la mateixa malaltia per veure quines variacions genètiques tenen en comú. També es compara amb l'ADN de les cèl·lules sanes del mateix pacient per trobar on és la diferència.

### Ajudant la indústria

Al departament d'Aplicacions per a la Ciència i l'Enginyeria del BSC es fan aplicacions sovint pensades per a empreses. Per exemple, fa anys que treballen amb Repsol per trobar petroli a zones complicades, com el golf de Mèxic. Cada perforació costa una milionada, i per tant qualsevol eina per afinar el tir és molt valuosa. El programari dissenyat pel BSC sap analitzar els senyals que envien els sonars, que travessen una capa d'aigua, una de sal i una de roca –en un viatge d'anada i



A baix, detall d'un rac de connexions del Mareostrum. Aquesta infraestructura requereix quasi 100 quilòmetres de cable per funcionar. A l'esquerra, els investigadors del departament de Ciències de la Vida del BSC han desenvolupat un programari per descobrir nous medicaments a través de complexes simulacions informàtiques.

tornada. Amb aquestes dades, el programari és capaç de trobar petroli en un de cada cinc intents, reduint molt els costos de perforació.

També han col·laborat amb Iberdrola per millorar la construcció de parcs eòlics a través de simulacions que ajuden a calcular l'orientació més eficient del parc. La supercomputació també serveix per predir quina producció d'electricitat tindrà un camp eòlic a curt termini, creuant dades meteorològiques amb dades sobre la ubicació i l'orientació del parc. Aquest mateix codi és capaç de treballar amb 100.000 processadors alhora i també es fa servir per a altres projectes, com l'Ayla Red, que té com a objectiu crear una simulació completa del cor humà. De moment ja estan fetes les fibres, que és una part molt complicada perquè és per on passa l'electricitat de les pulsacions. Amb aquest primer nivell ja es poden fer algunes proves de medicaments i marcapassos i la idea és que, un cop fet el model complet, es puguin fer proves fiables i personalitzades. Canviant les variables específiques d'un pacient, es podria fer una simulació computacional del seu cor i recrear com respondria a diferents tipus de proves, intervencions o tractaments.

### Endevinar la Terra

Tots ens hem queixat alguna vegada de les prediccions meteorològiques, que no sempre l'encerten. Oblidem, segurament, la ingent capacitat de càlcul que requereix l'estudi i la predicció dels complexos fenòmens del nostre planeta. L'avenç en aquest camp va intrínsecament lligat a la supercomputació i el departament de Ciències de la Terra del BSC investiga models matemàtics per millorar-ne la predicció. Els reptes actuals ho demanen. No és el mateix pronosticar el temps que farà l'endemà en un territori determinat que calcular l'evolució del canvi climàtic durant els propers anys. Aquest és, de fet, un dels camps d'estudi d'aquest departament del BSC. Els superordinadors necessiten processar dades provinents d'innombrables indicadors d'arreu del planeta. Per millorar la fiabilitat dels models cal poder introduir cada cop més dades i anar polint-los a mesura que es vagi comprovant l'encert de les prediccions.

El BSC, gràcies als seus estudis de la dispersió de la sorra del Sàhara –que amb les tempestes s'estén i causa problemes respiratoris en moltes parts de la conca mediterrània–, ha esdevingut un





centre especialitzat en sorra del desert en el marc de l'Organització Meteorològica Mundial. Al centre també s'estudia la qualitat de l'aire, que en pocs anys podria determinar-se amb molta més precisió i rapidesa. Josep Maria Martorell, director associat del BSC, assegura que no estem tecnològicament gaire lluny –potser només falta una generació de supercomputadors– de poder conèixer la qualitat de l'aire amb una resolució de deu metres. “Aquesta informació serà molt valuosa per a la gent amb problemes respiratoris. També permetrà, per exemple, determinar canvis en la gestió intel·ligent del trànsit en funció de l'evolució de la qualitat de l'aire quasi a temps real”.

### L'era postsilici

Tornem al principi, a la llei de Moore. Fins quan podrà continuar doblant-se, aproximadament cada dos anys, el nombre de transistors dels xips? Ningú s'atreveix a fer prediccions concretes, però és clar que el silici dels xips té un límit físic i que arribarà a un punt en què ja no hi cabran més transistors: amb tan poc espai entre ells, els xips es cremarien. Martorell assegura que estem encara molt lluny d'arribar al límit físic del silici i que els reptes que planteja

el salt de la petaescala a l'exaescala són uns altres: “No només caldran espais molt més grans per col·locar-los i no només caldrà fer possible la comunicació entre milions de processadors. El seu consum energètic augmentarà una brutalitat. El Marenostrom 3 gasta un milió d'euros a l'any en electricitat. I vint-i-cinc superordinadors com el Sunway TaihuLight, el més potent del món, necessitarien una central com la de Vandellòs per funcionar! El ritme a què som capaços d'avançar en la capacitat de processament no és el mateix al qual som capaços de reduir la despesa energètica, i això és un problema”.

I quan finalment s'arribi al límit físic del silici, què? “Ningú ho sap”, apunta Martorell, però hi ha diverses línies d'investigació explorant possibles vies. Per exemple, la dels nanomaterials, que podrien servir per fer xips que aguantessin més transistors. Una altra possibilitat seria el desenvolupament de maquinari amb noves arquitectures, inspirades per exemple en el cervell humà. Ja fa anys que, en el terreny del programari, es programa amb lògiques similars a les de les xarxes neuronals, entrenant els ordinadors perquè puguin aprendre de l'experiència

prèvia. “Pel que fa al maquinari, caldrà veure si la manera com es connecten les neurones pot ajudar-nos a trobar noves formes de connectar físicament els processadors”. El projecte europeu Human Brain Project, una metaplataforma per investigar el cervell humà amb el suport de la supercomputació, podria trobar solucions que anessin en aquesta línia.

Potser, fins i tot, podria haver-hi un canvi de paradigma en la computació de la mà dels ordinadors quàntics. Els nostres ordinadors, des de la primera màquina de Turing, funcionen amb bits que només poden tenir dos estats: 0 o 1. A escala quàntica, però, les partícules poden tenir molts estats a la vegada, i per tant els bits quàntics podrien arribar a computar moltes operacions alhora. La complexitat, però, és immensa, i si bé alguns experts pensen que en vint anys ja podrem tenir un ordinador quàntic amb cara i ulls, d'altres creuen que no podrem fabricar-ne mai cap.

De moment, però, el silici encara te corda. Molta corda. Prou perquè d'aquí a vint anys, si la computació continua galopant al mateix ritme, puguem portar el Sunway TaihuLight a la butxaca. ●