

ARTÍCULO

PERSPECTIVAS DEL SUPERCÓMPUTO EN MÉXICO

José Luis Gordillo Ruiz

Departamento de Supercómputo

Dirección General de Servicios de Cómputo Académico

Universidad Nacional Autónoma De México

Perspectivas del supercómputo en México

Resumen

El supercómputo ha mantenido un desarrollo constante. En los últimos años se han producido proyectos de infraestructura de gran impacto. Así mismo, en diversos países y contextos se ha expresado la necesidad de seguir manteniendo o impulsar más el desarrollo del supercómputo, por su importancia tanto en el avance científico y tecnológico, como en la economía, competitividad y seguridad de las naciones. En México, diversas organizaciones han llevado a cabo proyectos de supercómputo relevantes, que demuestran que el país puede ocupar un lugar competitivo en cuanto a capacidades de supercómputo. Para ocupar este lugar en los próximos años, se necesitará consolidar un ecosistema integrado por infraestructura (supercomputadoras, redes, almacenamiento, postprocesamiento, visualización) y comunidades, tanto de usuarios como de desarrolladores.

La construcción de este ecosistema plantea retos tecnológicos, como instalar y operar equipos con capacidades equivalentes a más de 200,000 cores actuales en los próximos cinco años, desarrollar software y herramientas para el aprovechamiento efectivo de la infraestructura, entre otros. También crea retos organizacionales, pues, como en toda ecología, el desarrollo eficaz de cada una de ellas requiere el desarrollo eficaz de las demás.

Palabras clave: supercómputo, ciencias computacionales, infraestructura, comunidades.

Perspectives on supercomputing in Mexico

Abstract:

Supercomputing is a field with a sustained growth. In recent years, several high-impact infrastructures had been deployed. Also, in several countries and geographical regions, concerns had been raised about the importance of maintaining the development of supercomputing technologies, because the main role they play not only into the advance of science and technology, but also into the development, competitiveness and security of nations. In Mexico, there are supercomputing projects that show it is possible for the country to occupy a noticeable place in the supercomputing realm. To achieve this goal, it is necessary to build up an ecosystem formed by infrastructure (supercomputers, advanced networks, massive storage, visualization), user communities and developer communities.

Building up this ecosystem poses technological challenges, as deploying and operating machines with the equivalent performance of more than 200,000 current cores, or developing software tools and applications that enable the effective size of supercomputing's benefits. It also creates organizational challenges, as each element's development requires the development of each other.

Key words: supercomputing, computational sciences, infrastructure, communities.

Introducción

El supercómputo ha mantenido un impulso constante en su desarrollo en las últimas décadas. Su importancia estratégica para el avance de la ciencia, la tecnología y el desarrollo en general de la sociedad, ha sido señalada y reconocida en varios ámbitos y foros. En este contexto resulta interesante proponer algunas perspectivas sobre su evolución en el país, considerando que el supercómputo va más allá de la instalación y la operación de supercomputadoras.

Hablar de supercómputo es referirse a la realización de investigación, a través del uso de supercomputadoras. Para tal efecto debe constituirse en un ecosistema en el que se relacionen y retroalimenten las comunidades específicas que requieren el supercómputo en su investigación, las comunidades que desarrollan tecnología computacional (tal como software, herramientas e interfaces) e infraestructura, que además de supercomputadoras incluye equipos de postprocesamiento, almacenamiento, visualización y redes avanzadas de telecomunicaciones.

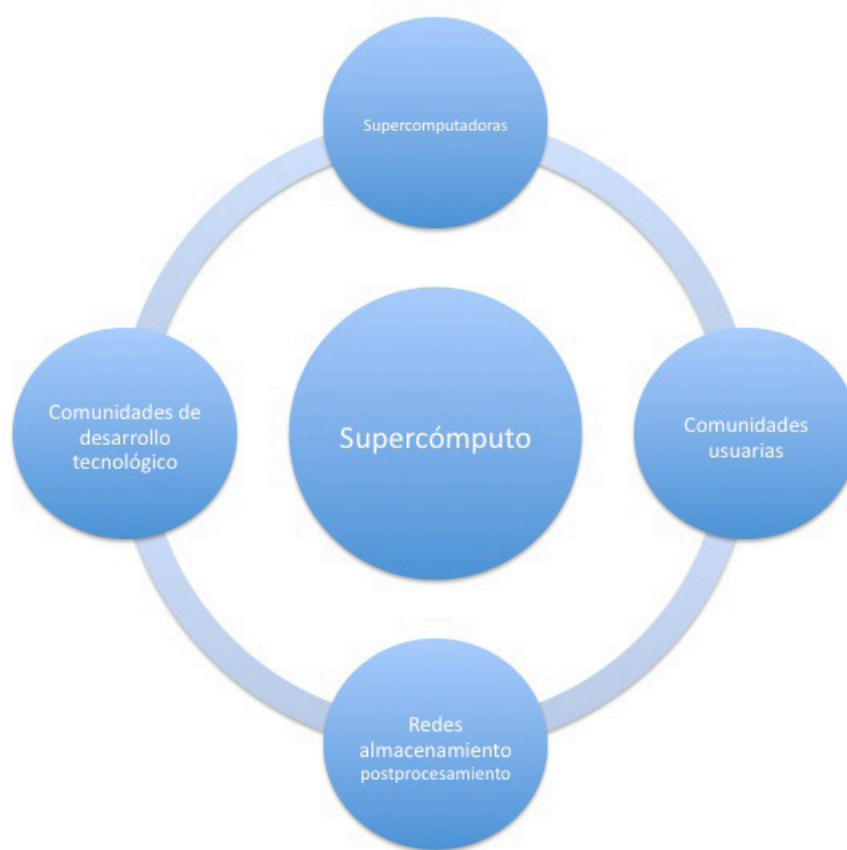


Figura 1. Elementos del ecosistema de supercómputo.

Evolución e importancia del supercómputo

El supercómputo se ha mantenido en un desarrollo constante. La clasificación Top500, que lista dos veces por año a las consideradas como las 500 computadoras más potentes del planeta, ha registrado desde 1975, con sólo dos excepciones, más de 400 nuevos equipos cada año, llegando a los máximos de 588 y 578 en 2007 y 2008, respectivamente. Además, a nivel internacional, tan sólo en la última década se produjeron proyectos de supercómputo de gran impacto, como el "Earth Simulator" en Japón, que en 2002 quintuplicó la capacidad de la que hasta entonces era la supercomputadora más grande del mundo, y se convirtió en una herramienta poderosísima para estudiar fenómenos planetarios, como el clima y los sismos. Otro ejemplo es el proyecto "Blue Gene", del Departamento de Energía de los Estados Unidos, que entre 2004 y 2005 cuadruplicó su capacidad, usando cientos de miles de procesadores de 700 MHz, colocándose como la máquina más poderosa del mundo durante 3 años consecutivos. Un

ejemplo más es la supercomputadora 'RoadRunner', que en 2008 se convirtió en la primera computadora en romper la barrera de los mil billones de operaciones por segundo (Petaflop/s), de acuerdo a la prueba de rendimiento 'linpack'.

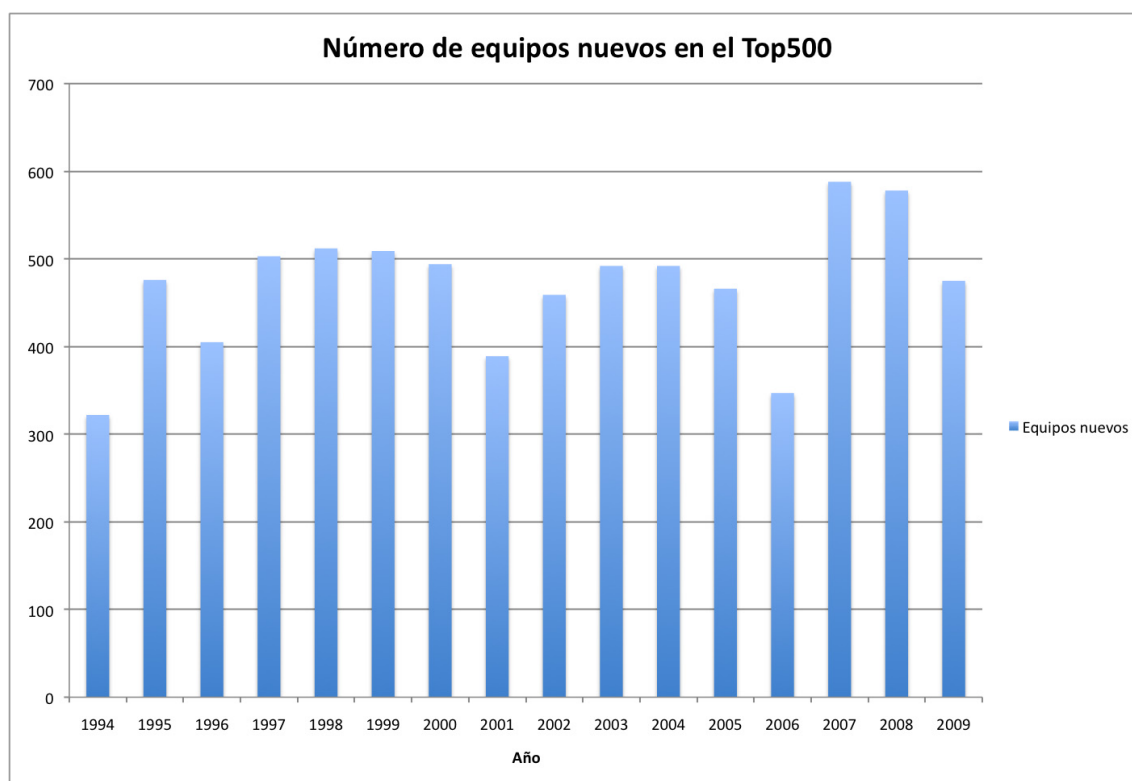


Figura 2. Número de supercomputadoras nuevas que se han añadido a la lista Top500 desde 1994

La preocupación por mantener el avance en el supercómputo, que permita proveer un soporte para la innovación científica y tecnológica, se ha mostrado en varios países. Por ejemplo, en Estados Unidos, el grupo asesor especial denominado President's Information Technology Advisory Committee (PITAC), entregó en 2005 el informe titulado "Computational Science: Ensuring America's Competitiveness", en el que establece que las ciencias computacionales; es decir, las ciencias que se apoyan en el uso de la computación para su desarrollo, es uno de los campos tecnológicos más importantes del siglo XXI, debido a que permite realizar estudios de fenómenos y procesos extremadamente complejos, tales como la fusión nuclear, el plegado de proteínas, la organización atómica de nanomateriales y la dispersión global de enfermedades. En dicho informe se afirma también que el uso de cómputo avanzado es crítico para mantener el liderazgo científico, la competitividad económica y la seguridad de aquel país. Asimismo, la National Science Foundation (NSF) ha dado continuidad a los programas de supercómputo que iniciaron con la fundación, en 1985, de los primeros centros de supercómputo: el National Center for Supercomputing Applications y el San Diego Supercomputing Center. Al programa de fundación de centros siguieron el programa PACI (Partnership for Advanced Computational Infrastructure) y el programa TeraGrid, que en los últimos 10 años proveyó más de 250 millones de dólares para fortalecer la infraestructura académica de supercómputo en los Estados Unidos.

Recientemente, la NSF creó en su estructura la Office of Cyberinfrastructure (OCI), para coordinar los esfuerzos que fortalezcan la ciencia computacional, el supercómputo y las tecnologías afines. Visiones y esfuerzos similares se han presentado en Europa, con la creación, en 2006, del "HPC in Europe Task Force (HET)", y los proyectos "Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE)", "Distributing

European Infrastructure for Supercomputing Applications (DEISA)" y "HPC-Europa2". Por ejemplo, en un documento publicado por HET en 2007 se menciona que "... al momento, no existe ningún recurso computacional en Europa que pueda equiparar las capacidades existentes en Estados Unidos o en Japón. Esta es una situación intolerable para la competitividad de las ciencias computacionales en Europa ...". Por otro lado, China pasó de tener un equipo de supercómputo en 1995 a tener 21 en 2009. Mientras que, en Rusia, junio de 2009, el presidente Medvedev criticó a la industria computacional de su país por no tener presencia en el desarrollo del supercómputo, y a la industria en general por perder competitividad al no aprovechar estas tecnologías.

En el ámbito mexicano, 2003, la industria petrolera instaló tres equipos que ocuparon los lugares 83, 84 y 85 en el Top500, siendo los lugares más altos en esta clasificación que se han conseguido en el país. Más tarde, la UNAM y la UAM colocaron equipos en los lugares 126 (2006) y 225 (2008), respectivamente. Otras entidades académicas, como el IPICYT, el CICESE y la Universidad de Sonora, también han establecido centros de cómputo de alto rendimiento. Otras han manifestado un gran interés en hacerlo. Por otro lado, el CONACYT financió recientemente 3 proyectos de laboratorios de supercómputo: la Delta Metropolitana de Cómputo de Alto Rendimiento, el Centro Nacional de Supercómputo del IPICYT y el Laboratorio Nacional de Grids.

Las supercomputadoras en los próximos años

Es bien conocido que las tecnologías de cómputo han mejorado su rendimiento a una tasa prácticamente constante en los últimos 40 años. En el ámbito del supercómputo, la evolución de este rendimiento puede observarse a través de la clasificación Top500. El Top500 de supercomputadoras se ha publicado dos veces por año desde 1993. Se da a conocer durante los eventos International Supercomputer Conference, que se lleva a cabo en verano en Europa, y Supercomputing, que se realiza durante el otoño en los Estados Unidos. Fue creado por Hans Meuer, de la Universidad de Mannheim, Erich Strohmaier y Horst D. Simon, del Laboratorio Nacional Lawrence Berkeley y Jack Dongarra, de la Universidad de Tennessee.

En la Figura 3 se muestra una gráfica del rendimiento reportado en el Top500 de las máquinas que han ocupado los lugares 1, 100 y 500 en las listas del segundo semestre de cada año, desde 1998. Es difícil predecir cómo evolucionarán las tecnologías de cómputo en los próximos años, pero, con fines prospectivos, puede suponerse que se mantendrá la regularidad de los años anteriores. Basándose en esta suposición, en la misma gráfica se muestra una proyección del rendimiento de las supercomputadoras hasta el año 2019. Se espera que para ese entonces la computadora más potente rebese la barrera del trillón de operaciones por segundo (Exaflop/s) en el Top500. Visto desde el presente, cuando apenas el año antepasado se consiguió rebasar el Petaflop/s, alcanzar la barrera del Exaflop/s parece un reto descomunal.

Sin embargo, es de notarse que la capacidad de las supercomputadoras, de acuerdo a la prueba linpack, se ha multiplicado por mil cada once años, pasando de los mil millones de operaciones por segundo (Gigaflop/s) en 1986, al billón (Teraflop/s) en 1997 y al Petaflop/s en 2008.

Figura 3. Rendimiento de las supercomputadoras 1, 100 y 500 en el Top500, y su proyección a 2019

Los casos de la industria petrolera (Top83, Top84 y Top85 en la lista de noviembre de 2003), y KanBalam en la UNAM (Top126 en la lista de noviembre de 2006), demuestran que en México es posible instalar, operar y aprovechar supercomputadoras que se ubiquen dentro o cerca del rango del Top100.

De acuerdo a la proyección de la Figura 3, lo anterior implica instalar un equipo de 1.7 Petaflop/s en el año 2015. Esta es la capacidad de la actual mayor supercomputadora del mundo, Jaguar, del Laboratorio Nacional OakRidge, que cuenta con 224,162 núcleos AMD Opteron. KanBalam cuenta con 1,368 núcleos

del mismo tipo; aunque esta máquina hipotética, sin duda sería muy poderosa, dejaría de pertenecer al Top500 apenas un año más tarde, de acuerdo con la misma proyección. Para 2019, un equipo tendría que contar con una capacidad de 20 Petaflop/s, equivalentes a más de 2,500,000 núcleos actuales, para ubicarse en el lugar 100 del Top500 de supercómputo.

Aunque estos números pueden causar una impresión de excesiva dificultad y complejidad, los avances en hardware y software van facilitando la construcción y operación de equipos de tal magnitud. Además, vasta recordar que en el año 2001 se reportó un rendimiento de 7.74 Teraflop/s para la supercomputadora en la posición 1 del Top500 y en ese entonces el equipo central de la UNAM tenía una capacidad máxima de 0.015 Teraflop/s. Cinco años más tarde, la UNAM alcanzó una capacidad máxima de 7.13 Teraflop/s con el equipo KanBalam.

Especificidad del rendimiento de una supercomputadora

El rendimiento de una computadora siempre tiene que estar referido a la prueba con que se mide. Esto es porque existe una gran variedad de arquitecturas de computadoras; tecnologías y modelos de organización e interconexión de procesadores, memorias y dispositivos de almacenamiento, y también una gran variedad de software, cada uno con diferentes patrones de procesamiento; accesos a memoria, comunicaciones, accesos a almacenamiento, precisión de los cálculos, paralelismo, de modo que una computadora que es muy eficiente para ejecutar cierto software no necesariamente lo es para todos los tipos de software existentes.

El criterio utilizado en la clasificación Top500 es el rendimiento obtenido en una prueba numérica, que resuelve un sistema de ecuaciones lineales, conocido como linpack. Mucho se ha discutido sobre la validez de esta prueba para especificar el rendimiento de una computadora, ya que sus características son poco representativas de la gran diversidad del software que habitualmente se utiliza en supercómputo. Se ha seguido usando la prueba linpack porque tiene algunas ventajas, como el hecho de que el rendimiento se representa mediante un único dato que es obtenido directamente de la prueba. Es sencillo de aplicar, y se cuenta con datos históricos, lo que permite hacer prospectivas como las de la Figura 3.

Otros esfuerzos se han hecho para tratar de representar de una forma más completa el rendimiento de equipos de supercómputo, como son los realizados por la organización Standard Performance Evaluation Corporation (SPEC) y los de la organización High Performance Computing Challenge Benchmark (HPCC).

Una organización, debe contemplar una forma de medir el rendimiento que indique cuál es el mejor equipo para los propósitos que busca con su adquisición. En organizaciones que instalan supercomputadoras para un propósito muy específico, como el proyecto BlueBrain, de la Escuela Politécnica Federal de Lausana, es relativamente sencillo definir pruebas de rendimiento adecuadas. Por el contrario, en ambientes más generales, como los centros de supercómputo de universidades, en donde existe una gran variedad, tanto de áreas de investigación como de software, es mucho más complicado establecer un mecanismo para determinar el rendimiento de una supercomputadora. En la UNAM se ha utilizado un índice de rendimiento que es calculado, a partir de los tiempos de ejecución de un grupo de aplicaciones representativas de las áreas de química cuántica, dinámica molecular y astronomía.

Así pues, definir el tamaño y las características de una supercomputadora no es trivial, y va mucho más allá de los resultados que se obtengan en el Top500. Debe analizarse una serie de factores, como son: el software que se pretende utilizar o cuyo desarrollo se pretende impulsar mediante el equipo de supercómputo; el número de proyectos/usuarios que se pretende apoyar; las habilidades y los conocimientos de los usuarios potenciales y los grupos que los asesoran y apoyan en cómputo; el rendimiento mínimo esperado, junto con los mecanismos efectivos para su evaluación; la relación entre rendimiento, costo de adquisición, costo de operación, gasto energético, espacio requerido y condiciones específicas de operación.

Nuevas tecnologías

Las mayores computadoras del mundo, comúnmente, son resultado de un trabajo de innovación tecnológica que se desarrolla en conjunto entre expertos de la industria y la academia. Con los años, estas propuestas suelen pasar a formar parte de productos bien identificados, que son los que suelen usarse en escalas menores del supercómputo.

Actualmente, las 10 mayores supercomputadoras del mundo son masivamente paralelas, con rangos desde los 224,162 a los 41,616 núcleos de procesamiento. Algunas de ellas están construidas con tecnologías específicas de cada fabricante, mientras que otras son clusters o grupos de elementos que pueden encontrarse en el mercado común de servidores con sistemas de interconexión estándar, principalmente Infiniband.

Se prevé que en los próximos años dos tecnologías de procesamiento se desarrollen de forma considerable: los procesadores multinúcleo y los procesadores gráficos. También existe una tendencia a introducir el uso de arreglos de compuertas reprogramables (FPGAs) en cómputo científico, aunque está un poco más retrasada con respecto a las anteriores.

La razón detrás del impulso reciente a procesadores multinúcleo y procesadores gráficos es que, por motivos de consumo y disipación de energía, no es viable construir procesadores más rápidos a través de incrementar su frecuencia de reloj. La única manera de incrementar su potencia es incluir más elementos de procesamiento en ellos.

En la actualidad los procesadores multinúcleo son comunes en el mercado de hardware, pero su mayor capacidad alcanza 4 u 8 núcleos por procesador. Se espera que en pocos años el número de núcleos se incremente a varias decenas. De forma similar, los procesadores gráficos han ido aumentando el número de elementos aritméticos que contienen.

El uso de procesadores multinúcleo y procesadores gráficos en el diseño de supercomputadoras, genera varios retos. Uno de ellos es cómo crear una computadora en la que estén balanceadas las capacidades de procesamiento de sus elementos con las capacidades de acceso a memoria y a mecanismos de comunicación. El otro es que se crean dos o más niveles diferentes de paralelismo en la misma máquina. No es trivial producir software paralelo en la escala de miles o decenas de miles de procesadores y tampoco lo es explotar el paralelismo interno de los procesadores multinúcleo.

Infraestructura complementaria

Los usuarios necesitan una infraestructura complementaria, adecuada a las capacidades de una supercomputadora. En primer término, dispositivos de almacenamiento de largo plazo, en donde puedan almacenarse las decenas de terabytes de datos que puede llegar a producir una sola simulación, así como el equipo necesario para el postprocesamiento y/o visualización de estos datos. Este tipo de equipos debe existir en ambos extremos, tanto cercanos a la supercomputadora como cercanos al usuario, y debe existir una red con la capacidad suficiente. También de extremo a extremo, que permita la transmisión de datos en tiempos razonables.

Por ejemplo, una de las motivaciones del proyecto de la Delta Metropolitana de Cómputo de Alto Rendimiento, es crear una red con la anchura de banda suficiente para permitir el intercambio de datos entre supercomputadoras, y que después evolucione para cubrir otros servicios que involucren el intercambio masivo de datos entre los miembros de las comunidades participantes.

Comunidades

Una vez que se tienen supercomputadoras e infraestructura adecuadas, es imperativo fomentar la adquisición de los conocimientos y las habilidades pertinentes para su aprovechamiento entre las comunidades que van a utilizar la infraestructura, así como crear y consolidar grupos que, en conjunción con los usuarios, generen software, herramientas e interfaces.

Una muestra de lo importante y urgente que es desarrollar el conocimiento necesario para el aprovechamiento de las supercomputadoras futuras, es el esfuerzo Great Lakes Consortium for Petascale Computation (GLCPC), que está asociado al proyecto de supercómputo Blue Waters. El GLCPC tiene como objetivo desarrollar estos conocimientos desde el nivel de preparatoria hasta el posgrado, con el fin de preparar a las nuevas generaciones de investigadores para realizar ciencia e ingeniería con supercómputo de gran escala. Algunos tópicos a los que se les debe prestar particular atención son: arquitecturas de supercomputadoras; compiladores y bibliotecas numéricas y de comunicación; técnicas de escalabilidad; herramientas de depuración, optimización y validación.

El número de usuarios y áreas de aplicación del supercómputo es grande. Por ejemplo, con el equipo KanBalam se han proporcionado recursos de supercómputo a cerca de 300 proyectos en 3 años. Estos proyectos se han clasificado en las áreas de astrofísica, física de altas energías, bioinformática, bioquímica, clima, computación, fluidos, fármacos, física estadística, física nuclear, geociencias, sismología, ciencias de materiales, nanociencias y química cuántica. También se han venido incorporando proyectos multidisciplinarios, enfocados al estudio de fenómenos económicos y epidemiológicos. Si bien en muchas áreas existen comunidades que desarrollan software eficiente para diferentes equipos de supercómputo, el cambio tecnológico que se avecina, con los diferentes niveles de paralelismo, requerirá de la adecuación de este software, o quizá su reelaboración. Además, en estas mismas áreas es común que no exista el software adecuado para todos los tipos de estudios, y existen áreas enteras en donde es necesario desarrollar software, por ejemplo, en los estudios emergentes que en humanidades y ciencias sociales se están llevando a cabo con recursos de supercómputo.

Además del software, debe considerarse que la cantidad de procesos y datos que se generan con el uso de supercomputadoras es sumamente difícil de manejar con las herramientas tradicionales. Esto puede ser un obstáculo para el efectivo apoyo que representa el supercómputo para la generación de conocimiento. Debe proporcionarse herramientas que faciliten el manejo de miles de procesos y sus datos de entrada y salida; postprocesamiento, clasificación y visualización de datos; así como la automatización de la transferencia de datos, la generación de procesos y la conexión de salidas de un proceso a entradas de otros.

Lo anterior es un indicio de la magnitud del esfuerzo que debe hacerse tanto para diseminar el conocimiento sobre las nuevas tecnologías entre estas comunidades, como para crear los grupos de especialistas que los apoyen en el desarrollo de su investigación.

Conclusiones

Buena parte del desarrollo en varias áreas del conocimiento, se realizará mediante métodos computacionales, para los que el supercómputo será indispensable. Las supercomputadoras de la escala que se han instalado y aprovechado en México, serán en los años 2015 y 2019 equivalentes a computadoras actuales del orden de 200,000 y 2,500,000 procesadores, respectivamente. Además de las supercomputadoras, se necesitará desarrollar infraestructuras complementarias, principalmente para postprocesamiento, visualización y

almacenamiento de datos, así como redes de telecomunicaciones avanzadas.

También se requerirán mecanismos para diseminar, entre la comunidad de posibles usuarios de la infraestructura, los conocimientos necesarios para su aprovechamiento. Estas comunidades deberán ser apoyadas por grupos de desarrolladores de software, herramientas e interfaces, que faciliten el uso de la infraestructura.

Todos estos elementos deben interactuar y retroalimentarse para su desarrollo. Las comunidades de investigación necesitan certeza sobre la evolución de la infraestructura a la que tendrán acceso, y los apoyos que tendrán para su utilización. De otro modo no podrán hacer planes para incluir o desarrollar métodos computacionales avanzados en su trabajo, ni verán sentido en incluir conocimientos de este campo en la formación de nuevos investigadores. De forma similar, las comunidades de desarrollo deben conocer las necesidades de los usuarios y la infraestructura que estará disponible, para proponer y desarrollar tecnologías computacionales adecuadas.

Referencias

"Supercómputo en la UNAM", <http://www.super.unam.mx>
supercomputo.izt.uam.mx

"Top500 supercomputersites", <http://www.top500.org>

"Earth Simulator Center", <http://www.jamstec.go.jp/esc/index.en.html>

"Blue Gene Supercomputer at Lawrence Livermore NationalLaboratory", [https://asc.llnl.gov/computing_ resources/bluegenel](https://asc.llnl.gov/computing_resources/bluegenel)

"RoadRunnerSupercomputer", <http://www.lanl.gov/roadrunner>

PITAC'sreport: "ComputationalScience: EnsuringAmerica'sCompetitiveness" [http://www.nitrd.gov/pitac/ reports/20050609_computational/computational.pdf](http://www.nitrd.gov/pitac/reports/20050609_computational/computational.pdf)

U.S. supercomputingleadringsSputnik-likealarmforRussia. [http://www.computerworld.com/s/ article/9136005/U.S._supercomputing_lead_rings_Sputnik_like_alarm_for_Russia](http://www.computerworld.com/s/article/9136005/U.S._supercomputing_lead_rings_Sputnik_like_alarm_for_Russia)

"Supercómputo en el IPICYT", <http://cns.ipicyt.edu.mx>

"Supercómputo en la Universidad de Sonora", <http://acarus.uson.mx>

"Supercómputo en el CICESE", <http://telematica.cicese.mx/computo/super/index.php>

"Jaguar Supercomputer", <http://www.nccs.gov/jaguar>

"Standard Performance Evaluation Corporation", <http://www.spec.org>

"HPC Challenge Benchmark", <http://icl.cs.utk.edu/hpcc/>

"Blue Brain Project", <http://bluebrain.epfl.ch/>

"Blue Waters Project", <http://www.ncsa.illinois.edu/BlueWaters/>

"Great Lake Consortium for Petascale Computation", <http://www.greatlakesconsortium.org/>