

# Las siete maravillas del mundo de HPC

Cómo la informática de alto rendimiento (HPC, por sus siglas en inglés) hace más grandes las grandes ideas, puesto que saca a la luz todo su potencial e impulsa la innovación.

### La HPC redefine el futuro

#### al fomentar los extraordinarios descubrimientos del presente

Muchos de los actuales avances se deben a la tecnología de HPC de Dell Technologies y AMD. Los datos extraídos de las investigaciones son muy amplios y se ven significativamente acelerados por la HPC para ayudar a lograr un futuro mejor.

Los descubrimientos innovadores de hoy son clave para nuestro futuro. Mejor salud, sostenibilidad ambiental y avance de la humanidad: todos estos factores se basan en la capacidad de innovar continuamente en ingeniería y ciencia. Estas son áreas

que a cada uno de nosotros, no solo ingenieros y científicos, nos entusiasma mejorar.

Aquí es donde los datos y la tecnología, en concreto la categoría de superordenadores de informática de alto rendimiento (HPC), entran en juego. La HPC ofrece posibilidades hasta ahora inimaginables que habilitan punteras innovaciones que pueden crear un futuro mejor para todos.

#### Índice

La potencia de la La HPC redefine supercomputación de HPC. el futuro página 1 Modelar el comportamiento Comprender cómo nuestros Descubrir la cura para de los incendios forestales cerebros almacenan la enfermedades información página 5 página 6 Investigar la ciencia Estudiar la biología Vencer a las enfermedades computacional cardiovasculares página 9



# La potencia de la supercomputación de HPC.

#### ¿Qué es HPC?

La informática de alto rendimiento (HPC) procesa cantidades masivas de datos mediante la realización de cálculos complejos a una rápida velocidad en varios servidores en paralelo. Un superordenador es una clase especial de HPC y es similar a tener miles de PC trabajando juntos para generar más potencia de computación y completar tareas complejas a una velocidad extraordinaria.

Por ejemplo, un PC con un procesador de 4,2 GHz puede realizar 4200 millones de cálculos por segundo. Después de alcanzar la exaescala en 2022, la HPC ahora puede realizar como mínimo un trillón de cálculos por segundo.

#### Soluciones HPC

Los tres componentes interdependientes de las soluciones de HPC son computación, red y almacenamiento. La arquitectura HPC diseña clústeres que se componen de cientos o miles de servidores, denominados nodos, que se conectan en red. Los nodos funcionan en paralelo para ofrecer velocidades de procesamiento increíbles que son el sello distintivo de la informática de alto rendimiento.

Las soluciones HPC de Dell se pueden implementar en las instalaciones, en el perímetro o en la cloud. En pocas palabras, las tecnologías HPC utilizan componentes de vanguardia, como CPU y GPU, que habilitan capacidades de procesamiento de última generación junto con componentes de almacenamiento y redes.

#### Sectores y aplicaciones de la HPC

Con un rendimiento récord, la HPC se está utilizando para resolver los problemas más complejos del mundo, que transforman los datos en información más rápido con AMD. Abarca aplicaciones y sectores como la investigación, el sector energético, la ingeniería, los servicios financieros y de salud o la industria automotriz y aeroespacial.

Para verlo mejor, vamos a analizar siete ejemplos impresionantes reales de la HPC en acción y el gran impacto que causan en la humanidad.

## Resolver los misterios del universo

nos ayuda a comprender de dónde venimos y a dónde vamos.

El telescopio espacial James Webb (JWST) junto con simulaciones de HPC realizó recientemente un descubrimiento importante e inesperado sobre la formación de las galaxias. Se está llevando a cabo una investigación para verificar que el descubrimiento sea real. El JWST ha descubierto seis nuevas galaxias, mucho más maduras y grandes de lo que nadie esperaba, de unos 13 500 millones de años; estarían ahí desde prácticamente el inicio del universo.

Sin HPC no habría sido posible realizar este sorprendente descubrimiento. Esto es porque para abordar preguntas considerables acerca de los orígenes del universo hace falta una gran cantidad de potencia de computación.

La Universidad de Durham en colaboración con Dell Technologies y AMD configuró un superordenador (COSMA) para empezar a responder a estas preguntas. El COSMA forma parte de la instalación de DiRAC, que consta de cinco implementaciones en las universidades de Cambridge, Durham, Edimburgo, Leicester y UCL¹. El COSMA permite a los científicos procesar una cantidad enorme de datos y realizar continuamente simulaciones enormes y en profundidad. Las pistas reveladas por el JWST se pueden utilizar para descubrir gran cantidad de datos sobre los orígenes y la formación del universo.

"Con la HPC podemos ejecutar simulaciones mucho más detalladas, que podemos comparar mucho mejor con las observaciones de los telescopios". Dr. Alastair Basden, responsable técnico del sistema de informática de alto rendimiento COSMA en la Universidad de Durham. "Esto nos ayudará a comprender la naturaleza del universo, la materia oscura, la energía oscura y cómo se formó el universo. En definitiva, nos ayudará a comprender los fundamentos del mundo en que vivimos".

<sup>1</sup> https://www.itpro.co.uk/data-insights/big-data/369538/big-data-nasa-james-webb-space-telescope



# "Con HPC, podemos encontrar correlaciones rápidamente y con precisión que no serían posibles de otro modo. Por ejemplo, nuestra investigación de ADN ahora puede analizar toda la secuencia del genoma, aumentar la precisión, ampliar el conocimiento y, en última instancia, impactar positivamente en las vidas de las personas". Dr. lan Fisk, Núcleo de Computación Científica Codirector del Flatiron Institute.

### Descubrir la cura para enfermedades

a una velocidad increíble transforma la atención al paciente y afecta a nuestra salud y nuestro bienestar.

El empeño por comprender el cuerpo humano no cesa. Muchos de los aspectos de nuestras redes moleculares, complejas y dinámicas, siguen siendo un misterio. La HPC está cambiando esta situación, ya que permite aplicar enfoques del genoma y complejos análisis que ayudan a explicar la alucinante sofisticación del cuerpo humano. Gracias a ello, los científicos están descubriendo información novedosa que ayuda a combatir las enfermedades y a mejorar vidas.

La secuenciación del ADN es el centro de la investigación del genoma. Para ser eficaz, utiliza un enorme volumen de ADN sin identificar de miles de familias de todo el mundo. El objetivo es analizar los datos y encontrar correlaciones entre el ADN y la enfermedades que se pueden usar para ayudarnos a prevenir y tratar mejor las enfermedades. El análisis de datos a esta escala y velocidad solo es posible con una cantidad masiva de potencia de computación (o HPC). Con un ejemplo, las secuenciaciones de ADN que antes tardaban 10 años en realizarse ahora se pueden llevar a cabo en un plazo de entre 4 y 6 semanas gracias a HPC.

Gracias a la combinación de la HPC y la secuenciación de ADN, la investigación del <u>Flatiron Institute</u>, una división interna de la Simons Foundation, reveló recientemente una correlación sorprendente. Los científicos que estudian las células renales de pacientes de COVID-19 y pacientes con nefropatía diabética descubrieron que ambos tipos de pacientes experimentaban un conjunto similar de procesos moleculares<sup>2</sup>. Este hallazgo sugiere que los pacientes con diabetes pueden ser especialmente vulnerables a la COVID-19 y plantea que el padecimiento de ambas enfermedades también puede ser letal. Además, el estudio desmintió la teoría previamente sostenida de que la medicación utilizada para la hipertensión y la diabetes no aumenta el riesgo de infección por COVID-19.

Y esto solo es el principio. Estos son solo los primeros pasos en la descodificación del genoma humano. Pero algo es cierto: la HPC en colaboración con la investigación del genoma están haciendo posible lo que, hasta hace bien poco, era imposible. Nuestros yos del futuro se beneficiarán de esto.

<sup>2</sup> https://www.simonsfoundation.org/2020/10/23/molecular-processes-in-kidney-cells-may-prime-diabetics-for-covid-19-infection/

### Modelar el comportamiento de los incendios forestales

nos ayuda a entender cómo mitigar su impacto, aumentar la seguridad de las personas y mantener mejor nuestro entorno.

Los incendios forestales están empeorando. Según un estudio realizado por el Instituto de Recursos Mundiales, actualmente se quema casi el doble de extensión de árboles que hace 20 años.<sup>3</sup>

Se prevé que los incendios forestales sigan aumentando en extensión y gravedad, impulsados por el calentamiento global y el cambio climático. Según el bucle de retroalimentación climático, cuanto más incendios forestales haya, más se fomentarán las condiciones para que se produzcan más.

Con el objetivo de proteger mejor la vida, la propiedad y nuestros bosques, el <u>San Diego Supercomputer Center</u> de la Universidad de California utiliza HPC con tecnología de Dell Technologies y AMD en su superordenador Expanse para modelar incendios forestales. El objetivo del modelado de HPC es comprender cómo se propagan los incendios forestales para que las predicciones más rápidas que lo que ocurre en tiempo real puedan ayudar a mitigar su impacto.

Dado que los incendios forestales son eventos complejos, altamente dinámicos y no planificados, el modelado de HPC es un proceso adecuado para descodificar su comportamiento. Los datos atmosféricos sobre la velocidad o la dirección del viento y la humedad (incluido el contenido de humedad del combustible) se combinan con otros como la topografía, los datos satelitales o los datos de cambio en la orografía para modelar el comportamiento de los incendios mediante las amplias y sofisticadas capacidades de simulación y modelado de HPC<sup>4</sup>.

"Este es un trabajo importante porque mitigar los impactos de los incendios forestales es esencial para garantizar un futuro sólido para comunidades de todo el mundo. La HPC es el vehículo que permite predecir la propagación de los incendios antes de que se produzcan y cuándo se pueden abordar de forma más eficaz. Una poderosa combinación", comparte Shawn Strande, director adjunto del San Diego Supercomputer Center en la Universidad de California, en San Diego.

El modelado de incendios forestales es una de las formas en las que la HPC nos está ayudando a crear un planeta más saludable.

<sup>4</sup> https://ral.ucar.edu/sites/default/files/public/file\_attach/features/KosovicHPCUserForum2022compressed.pdf



<sup>3</sup> https://www.wri.org/insights/global-trends-forest-fires



### Comprender cómo nuestros cerebros almacenan la información

no solo nos ayuda a responder preguntas fundamentales sobre el aprendizaje, sino también a mejorar la inteligencia artificial.

Hay recuerdos inolvidables. Y entender cómo nuestros cerebros los mantienen desde el punto de vista científico está dando un giro radical. Durante años se ha creído que los recuerdos estaban vinculados a neuronas específicas y a sus sinapsis conectivas. En el Centro de neurociencia computacional del Instituto de Flatiron, la HPC e investigaciones recientes han demostrado lo contrario y apuntan a un nuevo concepto denominado "desviación representacional".<sup>5</sup>

Cuando, por ejemplo, se conduce por un espacio conocido, las neuronas de recuerdo específicas que disparan la memoria no son fijas, como se había pensado hasta ahora, sino que van en un flujo constante. Un grupo de neuronas puede ser el responsable de la ruta del lunes, y otro de la del martes. Eso es una desviación representacional, un concepto vinculado a la relación en constante cambio entre las células, no las propias células específicas. A pesar de este fenómeno dinámico, nuestros recuerdos y comportamientos aprendidos se siguen manteniendo. Para los científicos, esta es una paradoja desconcertante.

Dell Technologies y AMD están ayudando a los científicos del Flatiron Institute a descubrir posibles respuestas a cómo funciona con el modelado de la desviación representacional. Los primeros hallazgos permiten conocer cómo funcionan las representaciones fluctuantes. En resumen, cuando una sinapsis no transmite, nuestras representaciones neurales se desvían en diferentes vías, pero mantienen patrones similares, lo que permite que nuestros recuerdos perduren.

"Nuestro trabajo de memoria cerebral representa la misión del Flatiron Institute de promover la investigación científica a través de métodos computacionales, esto es, el análisis, la teoría, el modelado y la simulación de datos. Si bien nuestro nuevo modelo es esencial, nos queda un largo camino para entender cómo funciona el cerebro", comenta el Dr. lan Fisk, codirector del Núcleo de Computación Científica en el Flatiron Institute. "Afortunadamente, la HPC impulsa nuestra investigación con una velocidad increíble".

El cerebro es una maravilla, pero también un misterio. Los modelos de HPC, "profesores" rápidos y potentes, nos educan sobre nuestro cerebro, nuestros recuerdos y sobre cómo aprendemos.

https://www.simonsfoundation.org/2023/03/09/computational-model-uncovers-new-insights-into-how-our-brains-store-information/

#### Investigar la ciencia de materiales

nos ayuda a mejorar nuestra postura energética de forma rápida, responsable y fiable, ya que nos esforzamos, colectivamente por mejorar el futuro para la humanidad.

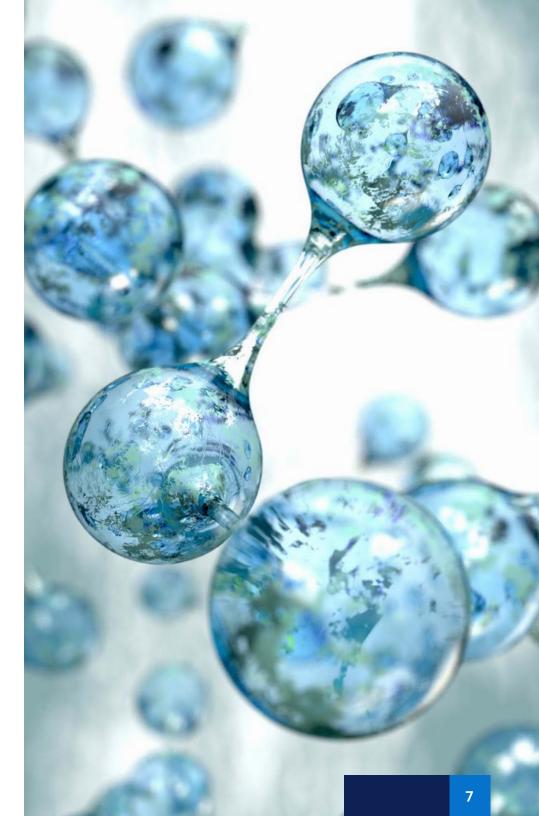
Los superconductores de temperatura ambiente, cuando estén completamente desarrollados, supondrán una innovación increíble para la sociedad. En la actualidad, los superconductores de temperatura ambiente son el santo grial de la física. Desentrañar cómo crear superconductores de temperatura ambiente ha tenido ocupados a los científicos durante décadas, y muchos de ellos dedican su vida a intentar superar este reto. Una vez que esté resuelto, la superconductividad cambiará el mundo muchísimo, en especial en redes eléctricas y transporte (vehículos eléctricos o sistemas de trenes de levitación magnética) e, irónicamente, en supercomputación.

En la actualidad, los conductores que transportan electricidad son ineficientes, ya que disipan aproximadamente entre el 6 y el 10 % de la energía generada por la red eléctrica a medida que pasa por ella.<sup>6,7</sup> Esto cuesta a los consumidores miles de millones de dólares al año en producción de energía desperdiciada y aumenta la dependencia que tenemos de los combustibles fósiles. Por el contrario, los superconductores habilitan una electricidad sin fricción, que funciona sin residuos ni calor excesivo. Históricamente, sin embargo, la superconducción solamente era posible a temperaturas ultrafrías, –450 °F. Los recientes descubrimientos parecen indicar prometedoramente que se puede superconducir a 59 °F, es decir, a temperatura ambiente.

En el <u>Flatiron Institute</u>, Dell Technologies y AMD están acelerando la investigación en ciencia de materiales para descubrir el increíble potencial de la superconducción. Este hallazgo elimina años de investigación, ya que permite simulaciones que amplían rápidamente la cantidad de materiales potenciales que investigar, quita del proceso los impedimentos e identifica las opciones de alta probabilidad.

"Nuestro trabajo en ciencia de materiales es importante porque hasta ahora se podían investigar unos 10 000 materiales o compuestos posibles en el transcurso de una carrera profesional. Hoy en día, la profundidad y la productividad de las investigaciones potenciadas por HPC permiten analizar 10 000 materiales en meses y con altos niveles de precisión, como un par de puntos porcentuales", apunta el Dr. lan Fisk, codirector del Núcleo de Computación Científica en el Flatiron Institute.

Esto significa que podemos revolucionar la energía y tomar una vía rápida para dejar los combustibles fósiles, lo que supondrá crea un mejor mañana mucho antes de lo que imaginamos.



<sup>6</sup> https://www.vice.com/en/article/y3gdgw/ok-what-is-room-temperature-superconducting-and-will-it-change-everything

<sup>7</sup> https://theconversation.com/a-tenth-of-all-electricity-is-lost-in-the-grid-superconducting-cables-canhelp-199001



# Estudiar la biología computacional

nos aproxima a encontrar la cura de las enfermedades.

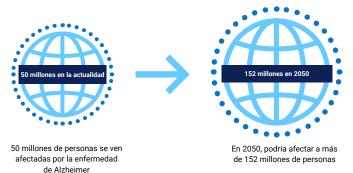
El Alzheimer cada vez es más común y afecta a aproximadamente 50 millones de personas en todo el mundo. Descubrir la causa de esta enfermedad es primordial. De no descubrirla, para 2050 podrían ser más de 152 millones de personas afectadas con Alzheimer.

Se está llevando acabo una investigación para encontrar una cura con el superordenador Expanse del San Diego Supercomputer Center (SDSC).\* Gracias a la biología computacional con ayuda del Expanse del SDSC, los investigadores de la Universidad de Kansas que estudian si la enfermedad de Alzheimer es algo familiar o algo genéticamente hereditario han hecho un descubrimiento importante. Las simulaciones de HPC de vanguardia aportaron los primeros datos mecanicistas sobre la y-secretasa, una importante enzima proteica en la enfermedad de Alzheimer familiar. Comprender las interacciones y mutaciones de la y-secretasa es clave para descubrir las vías para controlar mejor el pensamiento, el lenguaje y la memoria.

"Enfrentarse a la enfermedad de Alzheimer es una causa noble, gestionada de una forma única por Expanse, nuestro superordenador de HPC. Los primeros hallazgos de la investigación muestran prometedores resultados en la búsqueda continua de un tratamiento para la población en general, y nuestros científicos siguen trabajando incansablemente para lograr descubrimientos que ayuden", afirma Shawn Strande, subdirector del SDSC en la Universidad de California, San Diego.

Conforme la población mundial vaya envejeciendo, la investigación habilitada por HPC para encontrar tratamientos más efectivos para el Alzheimer supondrá una auténtica revolución para individuos, familias y comunidades.

\* Esta investigación ha sido posible gracias a la HPC y a las organizaciones patrocinadoras. Este trabajo ha sido financiado por la National Science Foundation y los Institutos Nacionales de Salud. El tiempo de supercomputación en Expanse ha sido financiado por el EXSEDE (Extreme Science and Engineering Discovery Environment) de la NSF.



## Vencer a las enfermedades cardiovasculares

nos permitirá vivir de forma más saludable y durante más tiempo gracias a la atención preventiva.

Cada año, mueren aproximadamente 56 millones de personas.8 La causa principal de muerte, responsable de más del 33 % de las muertes a nivel mundial es, por un amplio margen, la enfermedad cardiovascular.

Es más, una de las principales causas de las enfermedades cardiovasculares es la aterosclerosis. La causa clave que actúa pronto e inicia el desarrollo de la aterosclerosis es la formación de células espumosas. Y un factor importante en la formación de este tipo de células son las gotas lipídicas. Las gotas lipídicas son responsables del almacenamiento de lípidos, del equilibrio lipídico y de las posibles asociaciones de proteínas. De Curiosamente, el desequilibrio lipídico está relacionado con una serie de enfermedades que van más allá de la cardiovascular, como la obesidad, el hígado graso, la diabetes tipo 2, la enfermedad de Alzheimer o el cáncer. Es por eso que obtener información sobre las gotas lipídicas puede suponer un cambio abismal.

Esto llevó a los investigadores de la Universidad de Utah<sup>11</sup> a trabajar en el tratamiento de la aterosclerosis mediante la exploración de la formación de células espumosas y las gotas lipídicas. En el San Diego Supercomputer Center se utilizan equipos AMD EPYC en Expanse para modelar el efecto de los ésteres de esteroles y ARN sin codificación en los cambios en la fase de gotas lipídicas y las formaciones de células espumosas. Los avances en esta área de la ciencia podrían ayudar a millones de personas de todo el mundo a mitigar el impacto de las enfermedades que a menudo son mortales.

"Nuestros investigadores realizan un seguimiento de lo que se puede hacer con HPC en SDSC, un líder pionero en informática intensiva de datos y de alto rendimiento. Ayudar a enfrentar epidemias globales como la de la aterosclerosis es una gran demostración de lo que HPC puede hacer por nuestro mundo", comenta Shawn Strande, subdirector del SDSC de la Universidad de California, San Diego.

- 8 https://ourworldindata.org/causes-of-death
- 9 https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC7961492/
- 10 https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6770496/
- 11 https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.06.05.494869v1



