

# TERAFLOP



La nova aplicació  
de biblioteques  
ampliarà els serveis  
consorciats

ENTREVISTA

Miguel Beato, director del CRG

Tecnologia Grid per a recerca biomèdica

Avenços en ciència de materials

# Un nou tipus de supercomputadors distribuïts basats en processadors Cell i GPU Nvidia

La recent introducció d'acceleradors de processadors (AP) de baix cost, com ara el processador Cell d'IBM ([www.ibm.com/cell](http://www.ibm.com/cell)) i les unitats de processament d'imatges (GPU) de Nvidia ([www.nvidia.com/cuda](http://www.nvidia.com/cuda)), representen una innovació tecnològica important per a les ciències computacionals. Els actuals AP poden proporcionar una ordre de magnitud superior d'operacions de coma flotant per segon (flop/s) que els processadors estàndards, en línies generals un creixement a 10 anys segons la llei de Moore. Juntament amb les solucions distribuïdes i de computació Grid, aquests dispositius poden ser usats per convertir-se en una nova forma de supercomputació com als projectes [ps3grid.net](http://ps3grid.net) i [gputgrid.net](http://gputgrid.net), en els quals s'usen simulacions moleculars (accelerades) per simular centenars de complexos de lligand-proteïna amb especificitat molecular completa, un requisit crucial en els processos *in silico* en el disseny de nous fàrmacs.

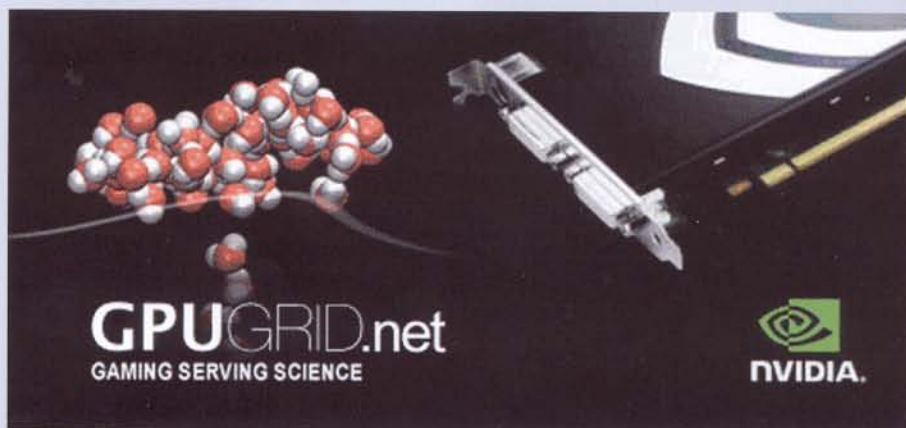
moltes, comparativament simples, unitats de processament. Aquestes unitats acostumen a estar optimitzades per tenir un rendiment en aritmètica de coma flotant més elevat que les CPU convencionals (vegeu figura 1a) a costa de ser capaces d'executar eficientment programes de ramificació, per exemple de maquinari de control reduït (vegeu figura 1). Actualment, cada fabricant està desenvolupant independentment les seves solucions, amb el processador Cell de Sony-Toshiba-IBM (STI) (vegeu figura 1b) i les unitats de processament de gràfics (GPU) de Nvidia (vegeu figura 1c) que ja han estat adoptades per una àmplia base d'usuaris. Els dispositius Cell i GPU són capaços d'aconseguir una ordre de magnitud més en operacions de coma flotant per segon (flops) que els processadors convencionals a un preu similar i, per a algunes aplicacions numèriques intenses, prometen una millora de rendiment de quasi 100 vegades. A més, com aquests dispositius estan dissenyats per al mercat massiu, són substancialment més econòmics que el maquinari de propòsit específic.

A la fi de 2006, vam desenvolupar el primer codi de dinàmica molecular per a simulacions biomoleculares que corria eficientment en el processador Cell (1). Aquest codi va ser capaç de proporcionar al voltant de 30 Gflops en un test amb un sistema molecular real, un nombre més alt que el que és possible amb CPU estàndards. L'acceleració mitjana va ser aproximadament de 16. De tota manera hi havia molt poques màquines amb processadors Cell disponibles. Fins que va arribar la nova Playstation3 el novembre del 2006. Va ser aleshores una opció natural el fet d'intentar usar BOINC (<http://boinc.berkeley.edu>) per distribuir i executar aquest codi en les consoles disponibles arreu del món. I ho vam fer, modificant la manera com BOINC solia treballar i habilitant un camí fàcil per instal·lar Linux a la PS3 usant una memòria USB. Més recentment, hem desenvolupat un codi MD per a les unitats de processament gràfic de Nvidia que distribuïm a [gputgrid.net](http://gputgrid.net).

Històricament, el rendiment del microprocessador havia millorat fonamentalment a través de l'augment de la velocitat de rellotge gràcies al desenvolupament de processos de fabricació cada vegada millors. En els darrers anys, ha augmentat la dificultat per mantenir l'increment de les velocitats de rellotge a causa de límits fonamentals intrínsecs a la tecnologia dels processos de fabricació i el consum elèctric. També el rendiment s'ha vist limitat per l'increment del cost relatiu d'accedir a la memòria principal, la velocitat de la qual ha crescut a un nivell inferior al de les CPU. Malgrat això, la llei de Moore, l'observació empírica segons la qual la densitat dels transistors en un circuit integrat es dobla cada 18-24

mesos, ha continuat complint-se. Els fabricants s'han vist forçats a reconsiderar el seu disseny de "nucli únic ràpid" i han usat un gran nombre de transistors per construir CPU que contenen múltiples unitats de processament independents. Tot i això, una gran part dels transistors de les CPU modernes continuen adreçats a proporcionar una memòria cau molt ràpida que s'usa per evitar el cost de comunicació al sistema de memòria principal, més gran però també més lent.

Recentment, alguns fabricants de maquinari han introduït un tercer tipus de dispositius, que anomenem acceleradors de processador (AP). Aquests AP tenen arquitectures diverses però comparteixen el mateix objectiu de tenir en un únic paquet



La interfície web del projecte ([www.gputgrid.net](http://www.gputgrid.net)) és un element clau per atraure voluntaris.

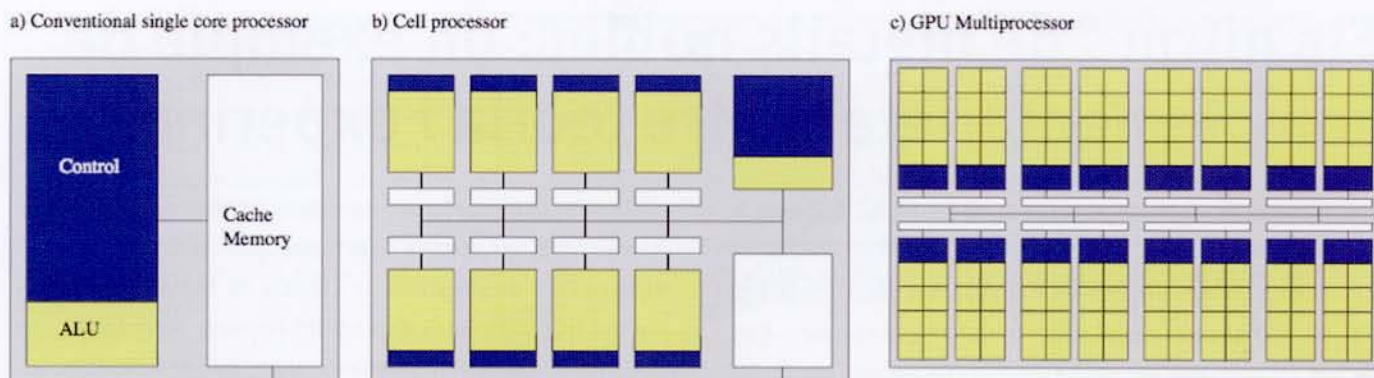


Figura 1. Diferent disseny d'arquitectura de CPU, processador Cell i GPU, on l'últim ofereix el major pic de potència computacional.

També estàvem utilitzant *grids* computacionals d'una manera lleugerament diferent al que és més habitual, ja que usem acceleradors de processador. Els *grids* computacionals permeten als científics distribuir simulacions a un conjunt de màquines per tal de beneficiar-se de la seva potència agregada. Inevitablement, fer un ús eficient d'un conjunt de màquines no dedicades presenta nous reptes. Donat que és probable que aquestes màquines no estiguin dedicades al càlcul durant l'horari laboral, el conjunt de màquines disponible ha de ser tractat com a transitori: el propietari d'un PC pot decidir aturar-lo en qualsevol moment, per exemple. Quan la computació distribuïda es combina amb maquinari equipat amb AP un únic node de càlcul és suficientment potent (equivalent a desenes de CPU) per simular trajectòries de dinàmiques molecular d'una llargada raonable en un dia per a un sistema molecular de l'ordre de 50.000 àtoms. El nostre ús de *grids* computacionals és, per tant, equivalent al que un gran supercomputador ens permetria, realitzant simulacions de dinàmiques molecular de gran escala usant milers de trajectòries per dia. Això es diferencia substancialment dels projectes BOINC previs que normalment programen molts (milers) de petits treballs en el *grid*.

La infraestructura distribuïda ha de tenir en compte això i ser capaç de corregir la pèrdua de resultats produïda per una simulació incompleta. Solucions de computació distribuïda, com ara el programari marc Berkeley Open Infrastructure for Network Computing (BOINC), han aconseguit al llarg dels anys la maduresa i estabilitat requerides per a aquests tipus d'aplicacions. Per exemple, en els projectes ps3grid.net i gpugrid.net, un servidor BOINC produeix centenars de càlculs al dia amb molt poca intervenció hu-

mana i amb una elevada fiabilitat en un rang divers de maquinari, incloent PlayStation3 i GPU Nvidia en PC repartides per tot el món. De manera similar, un *grid* distribuït dedicat "in-house" de targetes gràfiques Nvidia, que ja són usades als PC més moderns, podrien aconseguir un rendiment (taxa de transferència) només possible usant els majors recursos de supercomputació, però a una fracció del cost.

El primer experiment numèric de ps3grid.net que va usar dinàmiques moleculars dirigides per calcular l'energia lliure de la translocació d'un ió de potassi a través d'un porus transmembrana (3)

## BOINC produeix centenars de càlculs al dia en PS3 i GPU (en PC de tot el món)

proporciona un *benchmark* senzill de l'impacte de la computació distribuïda usant acceleradors de processador. ps3grid.net usa un codi MD que està optimitzat per al processador Cell (2) i executa una única simulació MD per client. Les trajectòries produïdes per aquest conjunt de simulacions estan subjectes a anàlisi estadístic per recuperar el perfil d'energia lliure de la translocació de l'ió. La primera prova del protocol computacional va ser realitzada usant maquinari estàndard de supercomputació amb unes quantes iteracions d'unes 50 execucions, cadascuna va durar mig dia en 32 processadors, amb un total de 19.000 hores de CPU i al voltant de 40 ns de temps de simulació (3). Un conjunt ampli d'experiments numèrics, executats a ps3grid.net, va produir 5.000 trajectòries, 4 microsegons de temps simulat, emprant 200 anys de temps de

CPU amb una resposta diària de 100 ns i 5 GB de dades. Aquest experiment numèric va produir un nombre de *pullings* que és com a mínim una ordre de magnitud més propra als experiments de *pulling* d'una sola molècula realitzats usant pinces òptiques.

Durant el passat mes de setembre, ps3grid i gpugrid han proporcionat aproximadament 10 Teraflop/s de potència computacional sostinguda les 24 hores del dia. Esperem utilitzar aquesta infraestructura per a experiments moleculars innovadors i recerca biomèdica. ■

### Agraïments

Aquest article resum els resultats apareguts en un parell de publicacions recents publicades per G. Giupponi, M. Harvey i J. Freixa-Villa. També agraïco a la companyia Acellera Ltd el suport tècnic i de maquinari.

### Referències

- (1) G. DE FABRITIIS, "Performance of the Cell processor for biomolecular simulations", *Comp. Phys. Commun.* 176, 670 (2007).
- (2) M. HARVEY, G. GIUPPONI, J. VILLA-FREIXA and G. DE FABRITIIS, "PS3GRID.NET: Building a distributed supercomputer using the Playstation 3, Distributed & Grid Computing-Science Made Transparent for Everyone". *Principles, Applications and Supporting Communities* (2007).
- (3) G. GIUPPONI, M. HARVEY and G. DE FABRITIIS, "The impact of accelerator processors for high-throughput molecular modeling and simulation", in press *Drug Discovery Today* (2008). DOI: 10.1016/j.drudis. 2008. 08.001.

### Gianni De Fabritiis

Computational Biochemistry and Biophysics Lab (GRIB-IMIM), Universitat Pompeu Fabra, Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona (PRBB) <http://multiscalelab.org/gianni> [gianni.defabritiis@upf.edu](mailto:gianni.defabritiis@upf.edu)