High Performance Computing Challenges for Bioinformatics: A Perspective from the Barcelona Supercomputing Center

En aquesta conferència, hi vam estar tant estudiants de l'assignatura TAB de 4t del grau de Genètica, com estudiants del màster de bioinformàtica. En Miquel Moretó ens va explicar una mica com és on ell treballa: el Barcelona Supercomputing Center. Ell principalment treballa amb el departament de computació, però no és ni de bon tros l'únic departament que hi ha.

El BSC, com el seu nom indica, té un superordinador, el Mare Nostrum. Aquest ha estat actualitzat en varies ocasions: actualment hi ha el MareNostrum 4, amb 11,15 Petaflops de potencia (pot fer 11.500 bilions d'operacions per segon). Tot això precedit d'una explicació en la ràpida evolució dels components. També ens va comentar la llista de superordinadors més potents del món, on es veu que als moments en que el MareNostrum és actualitzat, és dels més potents (dins del Top 20 mundial, normalment). Actualment (Top500 Novembre 2021) es troba en la posició 74. El rànquing del Top500, considerat el més oficial, evalua tant la quantitat de processadors com la quantitat d'operacions que pot fer, tant a la pràctica (Rmax) com de manera teórica (Rpeak)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
74	MareNostrum - Lenovo SD530, Xeon Platinum 8160 24C 2.1GHz, Intel Omni-Path, Lenovo Barcelona Supercomputing Center Spain	153,216	6,470.8	10,296.1	1,632

Figura 1: rànquing del MareNostrum al Top500 (Novembre 2021)

Mitjançant la potència computacional del MareNostrum 4, múltiples departaments poden estudiar amb molta rapidesa models extremadament complicats (per exemple, la predicció del clima). Un dels departaments és el de bioinformàtica, on hi ha moltes de les línies d'investigació que hem estudiat, com ara medicina personalitzada o Network biology (estudiant epigenética per entendre millor com funciona la diferenciació cel·lular). En ocasions, entitats externes poden demanar fer servir el superordinador per tasques que el requereixin.

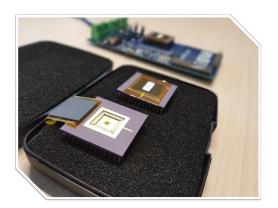
També ens va parlar de lAs i les companyies que les han desenvolupat, i una mica la seva història, comentant algunes de les més rellevants: DeepBlue, desenvolupada per IBM i capaç de derrotar al campió mundial d'escacs. També hi ha AlphaGo, desenvolupada per DeepMind de Google, que juga al Go.

Vaig veure en una de les diapositives que n'hi havia una que jugava a l'Starcraft II, un joc d'acció en temps real. Els RTS em criden força l'atenció i em diverteixen, encara que no hi jugo massa bé, i fa anys vaig jugar a l'SC original. Per aquest motiu vaig investigar una mica pel meu compte, i vaig trobar una mica d'informació extra sobre la IA en qüestió. Desenvolupada per DeepMind, i anomenada AlphaStar. A SC (totes les entregues de la saga) hi ha 3 faccions, totes molt diferents a nivells d'unitats i mecàniques. Per tant, es van

fer 3 IAs, cada una per una de les races: Terran (humans), Zerg i Protoss. Entrenades tant veient a humans jugar, com posteriorment jugant entre elles i contra altres IAs. Quan va acabar, van jugar online contra jugadors humans, i les 3 van aconseguir arribar al top 200 en un joc amb uns 90.000 jugadors competitius actius.



Figura 2: la IA AlphaStar (Protoss) contra el jugador finlandés Serral (Zerg)



Finalment, ens va parlar del projecte DRAC: Designing RISC-V-based Accelerators for next generation Computers. Es tracta d'un projecte on col·laboren el BSC i varies universitats catalanes: UAB, UB, UPC, URiV. L'objectiu és crear un processador segur i difícil de hackejar, que pugui ser utilitzat per l'estudi de la genòmica. Hi ha hagut diferents models (tots amb noms reptilians), i el que està projectat com a definitiu és el DRAC. Tots aquests processadors han estat creats amb RISC-V, un ISA (Instruction Set Architecture) de codi obert.