



Vista general del supercomputador MareNostrum.

El MareNostrum estrenará su quinta versión a mediados de 2023

España acelera en la carrera de la supercomputación

A finales del año 2004, el primer gran supercomputador español aterrizaba en el Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS). Se llamó MareNostrum 1 y se alzó de inmediato como el superordenador más potente de Europa y el tercero del mundo, destinado a revolucionar la investigación en todo tipo de disciplinas, como química, aeronáutica, biología molecular, me-

dicina, clima o ciencia de materiales. 18 años más tarde, el BSC-CNS prepara la construcción del MareNostrum 5, con una potencia 7 500 veces mayor que el de primera generación, que lo devolverá a las primeras posiciones en la carrera permanente de la supercomputación mundial. Entre sus nuevos proyectos se incluye la fusión nuclear.

■ Texto: **Patricia Contreras Tejada** | Periodista de ciencia ■

Si la falta generalizada de materiales no lo impide, el nuevo computador estará operativo a mediados de 2023. Con respecto de la versión actual (el MareNostrum 4), tendrá una potencia de cálculo 22 veces mayor. “Europa dispon-

drá de tres equipos de similar potencia de cálculo”, afirma Sergi Girona, director de Operaciones del BSC-CNS, que permitirán, por ejemplo, realizar predicciones mucho más fiables sobre el cambio climático, simular un reactor de fusión

nuclear al completo o producir imágenes médicas para mejorar la detección del cáncer.

Una mayor capacidad de cálculo se traduce en unas simulaciones más precisas, reduciendo la incertidumbre y me-

jorando la aproximación a la realidad, aunque no siempre es posible emularla por la complejidad del problema abordado. Así, Mervi Mantsinen, que dirige el Grupo de Fusión del BSC-CNS, reconoce que actualmente “hacemos todo lo mejor que podemos, pero muchos de los modelos teóricos que convertimos en códigos informáticos tan solo se aproximan a la física real”.

Pese a todo, “nos permitirá ver cosas que ahora no podemos”, dice José María Cela, director del departamento de Aplicaciones Computacionales para la Ciencia y la Ingeniería (CASE, por sus siglas en inglés) del centro. Por su parte, Josep de la Puente, que lidera el proyecto QUS-Tom, también dentro del BSC-CNS, para generar imágenes médicas por ultrasonidos y contribuir a la detección precoz del cáncer de mama para poder reducir el número de mamografías, considera que el nuevo supercomputador aporta “la capacidad de calcular cosas que dentro de diez años se podrán hacer sin él”.

El nuevo supercomputador excederá las fronteras del BSC-CNS y será de utilidad para toda Europa. Puesto que la Comisión Europea ha aportado la mitad de la financiación, tendrá acceso al 50 % del tiempo de computación y lo gestionará a través de convocatorias a nivel europeo. De un modo similar se organizará el acceso dentro de España, según explica Girona, con convocatorias realizadas por la Red Española de Supercomputación, para priorizar las actividades más competitivas. España tendrá acceso a algo más de un tercio del tiempo de computación, mientras que Turquía y Portugal dispondrán de fracciones más pequeñas, proporcionales a su contribución económica.

Quizá el verdadero avance del MareNostrum 5 con respecto a su antecesor no sea tanto la mejora en la capacidad de cálculo como la eficiencia energética que conseguirá. Los más de 300 000 bi-

llones de operaciones que realizará cada segundo implicarán un consumo de energía nada desdeñable, al que se añade el coste de refrigeración para evitar el sobrecalentamiento del sistema. A diferencia de la versión anterior, el MareNostrum 5 utilizará la refrigeración por agua. Un circuito conducirá agua templada por las partes del computador que disipan más calor, expone Girona, calentando el agua que luego se aprovechará para otros cometidos.

Gracias a este innovador sistema, el MareNostrum 5 logra reducir la proporción de energía requerida para enfriar la computadora en comparación con la que consume el ordenador en sí. Además, el BSC-CNS tiene dos equipos dedicados a acelerar los códigos informáticos que se ejecutan en el superordenador. “Al mejorar el rendimiento, se consiguen los mismos resultados utilizando menos tiempo y, por ello, menos energía”, apunta Girona. “Sin embargo, como los orde-

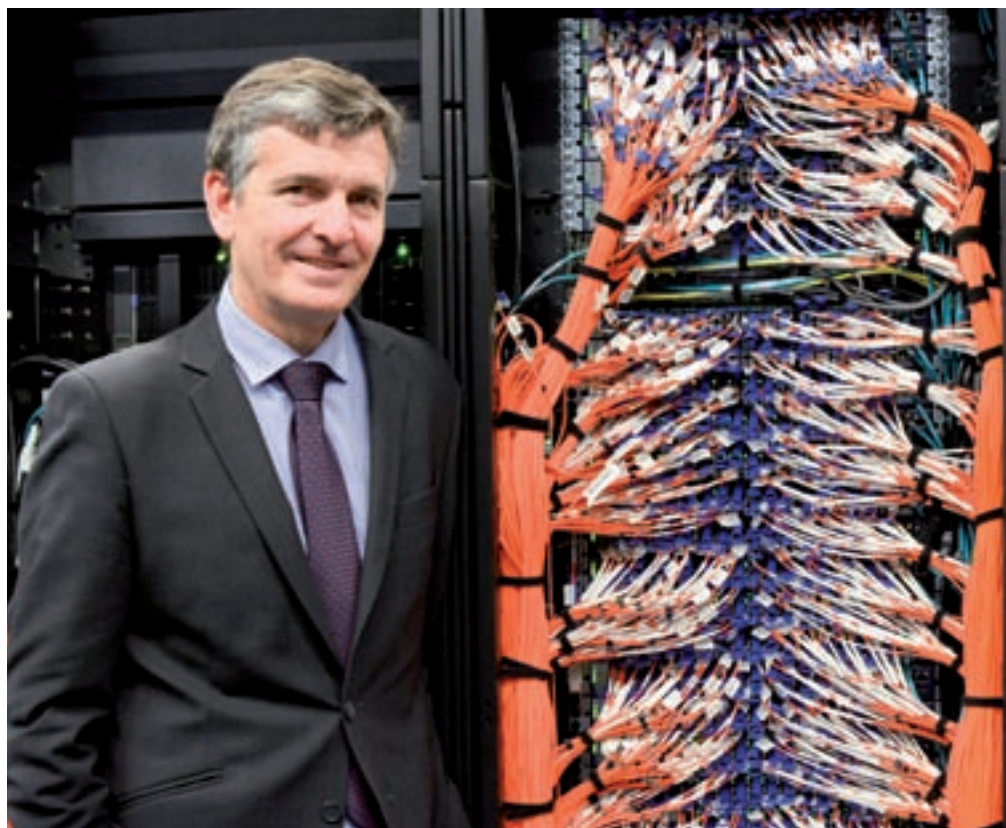
nadores nunca están ociosos, la energía consumida acaba siendo la misma, lo que ocurre es que se pueden solucionar más problemas científicos”, precisa.

El superordenador que está ahora en construcción supondrá un salto considerable con respecto a la capacidad actual. Su posición destacada entre los superordenadores de todo el mundo dará alas a la investigación de nuestro país. “MareNostrum 5 es una herramienta imprescindible para la investigación básica y aplicada en España, que permitirá a los científicos españoles competir y cooperar a nivel mundial en los mayores descubrimientos científicos de los próximos años”, asegura Girona, y De la Puente remata: “el MareNostrum 5 es un vistazo al futuro”.

Imágenes en la nube

“Un falso positivo [en el diagnóstico de cáncer de mama] le cambia la vida a una persona de manera innecesaria”, advierte

BSC-CNS



Sergi Girona, director de Operaciones del BSC-CNS.

el investigador Josep de la Puente. Las semanas o meses que pueden transcurrir hasta que se desmiente el diagnóstico constituyen una carga emocional importante, y el estudio adicional requerido implica un sobre coste para el sistema de salud. El proyecto de Tomografía Estocástica Cuantitativa por Ultrasonidos (QUSTom, por sus siglas en inglés), que dirige De la Puente, aspira a reducir el número de falsos positivos que surgen en los programas de cribado actuales.

El proyecto QUSTom pretende obtener imágenes por ultrasonidos para complementar, quizás en el futuro sustituir, a las mamografías, que actualmente constituyen la técnica principal de diagnóstico para el cribado de cáncer de mama. Además de ocasionar un porcentaje sustancial de falsos positivos, “el principal problema es que emiten radiación ionizante, que limita la usabilidad de esta tecnología”, explica De la Puente, aumentando la edad de inicio en los programas de cribado

jer), en una mamografía puede ser complicado distinguir el tejido sano de los tumores y otras lesiones.

Por eso, su equipo está desarrollando un método de diagnóstico alternativo que proporcione imágenes tan reconocibles como una mamografía pero que supere los inconvenientes asociados a estas. Los ultrasonidos no conllevan radiación ionizante y, además, tanto la resolución como la capacidad de distinguir tejidos en estas nuevas imágenes es mayor. Así, el personal de QUSTom espera que su técnica reduzca los falsos positivos y facilite el diagnóstico precoz del cáncer de mama.

Sin embargo, a diferencia de las mamografías, en la nueva metodología “el procesado de los datos es algo demasiado costoso para hacerse in situ”, expone De la Puente. “Esos datos tienen que desplazarse a un lugar donde se hace un cálculo muy intensivo, y de ahí sale una imagen con un tiempo de retraso y usando unos recursos computacionales que no suelen

cualquier mejora del programa informático que elabora las imágenes se puede implementar de manera centralizada.

Las expectativas sobre el nuevo sistema son elevadas. El BSC-CNS colabora con el Hospital Vall d’Hebron para la realización de este proyecto, un centro donde, según constata De la Puente, “tienen lo mejor en adquisición de imagen y una unidad dedicada a la salud de la mujer con muchísima experiencia en cáncer de mama, pero ven carencias en su metodología”. De ahí el interés en participar activamente en el proyecto QUSTom, dice el investigador: “ven que lo que nosotros proponemos les mejora, y mucho, su capacidad de detectar tumores, sobre todo en estadios tempranos”.

La primera prueba piloto, precisamente en el Vall d’Hebron, comenzará ya a finales de 2022 y constará de un estudio con pacientes que se someten a las pruebas habituales de cribado. Una selección pasará también por el sistema QUSTom para comparar resultados y lograr, según espera De la Puente, “una prueba de concepto” de que la nueva metodología proporciona imágenes comparables a las existentes. Después será necesario realizar un estudio clínico que durará entre dos y tres años, y solo entonces se podrá implantar de manera más generalizada. Son varias las etapas a superar, pero el coordinador de QUSTom tiene plena confianza en que esta nueva técnica llegará a formar parte del repertorio cotidiano de los hospitales: “en cuestión de tres años debería empezar a usarse en algún contexto”.

BSC-CNS



Entrada a la antigua capilla que alberga hoy el MareNostrum.

y la frecuencia de las pruebas. Más aún, si la densidad de la mama es elevada (algo que ocurre en la mitad de las mu-

ser parte de la imagen convencional”, añade. Por eso QUSTom apuesta por un modelo de computación en la nube que, además, tiene una ventaja importante:

Soles en la Tierra

“La energía de fusión es segura, muy limpia y abundante, y es accesible para todas las naciones”, afirma Mervi Mantinen. La investigadora lidera el Grupo de Fusión en el BSC-CNS, donde trabaja en modelización y computación de alto rendimiento para conocer mejor los fu-

turos reactores de fusión, que Mantsinen define como “un sol caliente en la Tierra”. Estos aparatos están diseñados para unir átomos de hidrógeno y formar helio, el mismo proceso que tiene lugar en las estrellas y que genera una gran cantidad de energía.

Aunque la fusión no es aún viable como fuente de energía, Mantsinen y su grupo forman parte de una comunidad mundial que trabaja para lograr que lo sea. La hoja de ruta que ha definido Europa para orientar la investigación en fusión destaca los modelos computacionales como herramienta clave para conseguir los objetivos propuestos, explica Mantsinen, que zanja: “todo lo que hacemos va dirigido a asegurarnos de que los reactores de fusión funcionen, y que funcionen de la manera más eficiente posible”.

En concreto, estudian cómo calentar el combustible, formado por deuterio y tritio, dos isótopos del hidrógeno, a la altísima temperatura que se requiere para que se produzca la fusión (del orden del centenar de millones de grados) y saber cómo se mueven las partículas generadas al aumentar la temperatura, cuyo comportamiento es “fascinante”, según Mantsinen. Para verificar los modelos computacionales experimentalmente, actualmente se está construyendo un aparato que dilucidará los procesos físicos que hay detrás del rapidísimo movimiento de estas partículas.

Además, el grupo de Mantsinen trabaja para comprender qué materiales son los más indicados a la hora de construir los reactores. Para soportar el enorme contraste de temperatura entre el interior y el exterior hacen falta soluciones innovadoras que los modelos de Mantsinen tratan de diseñar. Como eje transversal a toda la labor del Grupo de Fusión, la computación de alto rendimiento requiere una línea de investigación en sí misma para acelerar los códigos infor-



máticos que ya existen, desarrollar otros nuevos y adaptar las herramientas del BSC-CNS a los problemas relacionados con la fusión. Todo ello va orientado a

“aportar valor a la comunidad de fusión”, recalca Mantsinen.

Si la computación es una herramienta clave en el estudio de la fusión



Josep de la Puente lidera el proyecto Tomografía Estocástica Cuantitativa por Ultrasonidos.

La supercomputación y el Consejo

El Consejo de Seguridad Nuclear (CSN) quiere aprovechar la amplia experiencia del departamento CASE del BSC-CNS en la simulación de procesos físicos relacionados con la seguridad nuclear y la protección radiológica. Por ello se ha propuesto llevar a cabo una colaboración que en el futuro permita modelizar, por ejemplo, el comportamiento a largo plazo de los almacenes de residuos radiactivos, donde estos interactúan con la pared del almacén. También tienen interés en simular el comportamiento de los materiales irradiados, así como la interacción entre el núcleo de un reactor nuclear de fisión y el fluido refrigerante. El CSN ya cuenta con algunos modelos en forma de código informático que el CASE espera poder acelerar “para que se ejecuten de forma más eficiente en los computadores”, dice Cela. Otros códigos que aporte el CSN requerirán de un análisis más fino ya que si el modelo depende de varios parámetros cuyo valor no se conoce de manera precisa, sino que pueden variar ligeramente, es ne-

cesario probar muchas combinaciones para conocer qué sucede cuando todos los parámetros cambian a la vez, lo que podría darse en los Análisis Probabilísticos de Seguridad dinámicos. “Es un estudio estocástico”, según Cela, “para simular el efecto acumulado de muchas variables que tienen una pequeña oscilación aleatoria”. Por parte del CSN coordinan esta colaboración los consejeros Francisco Castejón y Elvira Romera, que han acordado con Cela los problemas a abordar en el corto plazo, eligiendo como proyectos piloto uno relacionado con la seguridad nuclear, otro con la protección radiológica y un tercero encaminado al licenciamiento de la futura instalación IFMIF-DONES de investigación en materiales para la fusión, que se instalará en Granada. “Nosotros proporcionaremos las herramientas”, afirma Cela, para que el CNS pueda avanzar en el conocimiento que le permita llevar a cabo su misión en materia de seguridad nuclear y protección radiológica en desarrollos futuros. Es decir, a diferencia de otros proyectos enfocados a la investigación más básica, este “será un proyecto aplicado a problemas concretos que hay en España”

es porque los experimentos no son fáciles de realizar. Con todo, los reactores de fusión a nivel mundial suman casi un centenar, atestiguando la importancia que se le ha dado a esta línea de investigación en las últimas décadas. En cada campaña experimental, al equipo local se suma un contingente de fuera, formando una colaboración dedicada a impulsar cada experimento con el objetivo de que la energía de fusión sea una realidad, porque “somos una comunidad muy internacional, que trabaja unida para conseguirlo”.

La investigadora del BSC-CNS aguarda con avidez el estreno de ITER, un aparato situado al sur de Francia que, según lo previsto, demostrará que la energía de fusión es técnicamente viable. “Toda la comunidad de fusión espera con ilusión la puesta en marcha de esta máquina a lo largo de la década actual”, dice entusiasmada. Según la hoja de ruta europea, para la segunda mitad de siglo será posible tener plantas

de energía de fusión operativas. Pero la investigadora precisa que existen varias iniciativas para acelerar el calendario todavía más, y destaca el reciente interés privado, que está aportando una importante financiación.

Precisamente la dificultad de lograr que la fusión sea una fuente viable de energía es lo que la hace segura, dice Mantsinen, ya que “el proceso es tan complicado de lograr que, si algo va mal, la planta se apaga sola. Hasta donde podemos ver, no habrá grandes accidentes”, detalla. Además, explica que las materias primas necesarias son fáciles de conseguir. El deuterio se encuentra en el agua de mar y el tritio se fabrica a partir del deuterio y el litio, un material “abundante en la corteza terrestre en todas partes”, asevera la investigadora. “En el contexto actual, me gusta la idea de que nadie tenga que depender de nadie”, añade esperanzada. “Cuando tengamos la solución [para generar este tipo de energía], se puede



José María Cela, director del Departamento de Aplicaciones Computacionales para la Ciencia y la Ingeniería.

propagar a todos los rincones del mundo. Esta idea nos da motivación para seguir”, concluye.

Desbancando al laboratorio

Hay problemas que son imposibles de resolver en un laboratorio. A veces falta presupuesto, otras veces falta tiempo y, en otras ocasiones (como para estudiar una supernova), el problema simple-




Mervi Mantsinen, que lidera el grupo de fusión nuclear del BSC-CNS, ante el MareNostrum.

mente excede las dimensiones de la Tierra. En estos casos, la simulación por ordenador es una herramienta clave. Pero ni siquiera sirve cualquier computador: para resolver las ecuaciones que rigen los fenómenos más complejos de la naturaleza hace falta realizar tantas operaciones que se necesita un superordenador como el MareNostrum. Ese es el cometido del Departamento de Aplicaciones Computacionales para la Ciencia y la Ingeniería (CASE, por sus siglas en inglés) del BSC-CNS, que dirige José María Cella, cuyo trabajo abarca desde la interacción del viento con un aerogenerador hasta la estabilidad del plasma dentro de un reactor de fusión. “Además, sabemos programar esos métodos numéricos de forma eficiente en el computador para sacarles el máximo rendimiento”, continúa. Otra estrategia habitual en el departamento es utilizar inteligencia artificial para hacer predicciones en función de un conjunto de datos, sin necesidad de conocer de antemano las ecuaciones que describen esos datos.

“Conocemos las ecuaciones que rigen diferentes fenómenos físicos: fluidos, sólidos, ondas, partículas... Y sabemos aplicar métodos numéricos para resolverlas de la mejor manera posible”, explica

Mientras la comunidad científica espera poder disponer del MareNostrum 5, los ojos del BSC-CNS ya están puestos en la siguiente generación del computador. Actualmente lideran una iniciativa

europea para diseñar aceleradores de bajo consumo eléctrico que disminuyan aún más el coste energético de la supercomputación. “Esperamos poder tener la primera versión cuando instalemos el MareNostrum 6 dentro de cinco o seis años”, sostiene Girona. Se añadirá además el reto computacional de llegar al trillón de operaciones por segundo, casi diez mil veces más que la velocidad disponible actualmente. 



[VIDEO] Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS)