



MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES



Financiado por
la Unión Europea



European Research Council
Established by the European Commission



MEMORIA JUSTIFICATIVA DE LAS ESPECIFICACIONES TÉCNICAS PARA EL SUMINISTRO DEL SISTEMA DE COMPUTACIÓN PARA EL PROYECTO “THE TRAIL OF SULPHUR: FROM MOLECULAR CLOUDS TO LIFE (SUL4LIFE)” DESTINADO AL CENTRO DE ASTROBIOLOGÍA DE LA AGENCIA ESTATAL CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS.

Equipamiento destinado al proyecto SUL4LIFE, financiado por el European Research Council (ERC), Grant Agreement No101096293.

El Suministro del sistema de computación para el proyecto SUL4LIFE para el Centro de Astrobiología requiere una serie de especificaciones técnicas que se detallan en el Pliego de Prescripciones Técnicas. A continuación, se enumeran las especificaciones consideradas más importantes, así como la justificación argumentada de cada una de ellas:

- I. 3 servidores de cómputo HPC teniendo cada uno de ellos:
 - 2 procesadores de 96 cores y 192 hilos de ejecución SMT, cada uno, y una memoria caché L3 de al menos 1GB.
 - Mínimo 1TB de memoria RAM.
 - Al menos 40TB de capacidad de almacenamiento NVME.
 - 2 tarjetas puertos Infiniband de 200Gbps.
 - 1 unidad de red de dos puertos QSFP28 100Gb/s.

Uno de los pilares sobre los que se ha diseñado el proyecto SUL4LIFE es la ejecución de simulaciones numéricas utilizando técnicas de computación de dinámica de fluidos magnetohidrodinámicas, mediante una versión adaptada del código de software libre RAMSES. Para ello, en la propuesta mediante la cual se concedió la subvención se contempló el uso de ordenadores HPC y se presupuestó una partida para ello.

Uno de los cálculos estándar que se pretende realizar de manera rutinaria en los servidores HPC es la simulación del colapso de condensaciones de $R \sim 10000$ au para formar una estrella de masa solar y su disco proto-planetario. En base a la experiencia proporcionada por otros usuarios de RAMSES, así como por sus desarrolladores, se ha estimado que este tipo de cálculos alcanzan su rendimiento óptimo a partir de aproximadamente 190 hilos de ejecución simultánea. De las soluciones tecnológicas existentes, se ha llegado a la conclusión de que una arquitectura de al menos 96 núcleos con 2 hilos cada uno resulta la opción más adecuada.

Por otro lado, se espera que la interrelación entre los hilos de ejecución sea alta, lo que podría traducirse en un uso intensivo de la memoria caché. Al estar dicha memoria caché compartida por todos los hilos de ejecución, se ha preferido optar por la mayor memoria caché posible, considerándose que se requieren al menos 1GB. Los benchmarks disponibles en internet sugieren que esto podría mejorar el rendimiento en un 30%.

Otro de los tipos de cálculos que se pretende realizar son a mayor escala, por ejemplo la simulación de la formación de asociaciones de estrellas en una nube molecular masiva, y requieren de la utilización de más hilos de ejecución que los que se puede hacer con un único procesador, necesitando por tanto de más procesadores y de más nodos de computación.

Ref.OTE 195/23. SUMINISTRO DEL SISTEMA DE COMPUTACIÓN PARA EL PROYECTO “THE TRAIL OF SULPHUR: FROM MOLECULAR CLOUDS TO LIFE (SUL4LIFE)”. CENTRO DE ASTROBIOLOGÍA.

Versión formato del documento: 17.03.23

CSV : GEN-2d82-e822-1724-fd5d-9f4f-84eb-b81a-942b

DIRECCIÓN DE VALIDACIÓN : <https://portafirmas.redsara.es/pf/valida>

FIRMANTE(1) : FRANCISCO NAJARRO DE LA PARRA | FECHA : 19/02/2024 13:29 | Informa





MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES



Financiado por
la Unión Europea



European Research Council
Established by the European Commission



Para una comunicación óptima entre ellos, se requiere el uso de tecnología Infiniband, siendo más rápida que una comunicación por red y por tanto de uso habitual en clusters HPC.

Además de Infiniband, se hacen necesarias dos tarjetas de red de 100Gb/s para conectarlos a los servidores de procesamiento y de almacenamiento que se detallan más abajo.

La memoria RAM ya instalada debe ser de 1TB o superior dado que la ejecución de un gran número de procesos en paralelo conlleva la necesidad de muchos datos de trabajo. Así mismo, para almacenamiento local de los datos se ha estimado que se necesitan al menos 40TB para guardar los datos de trabajo antes de moverlos al servidor de almacenamiento. Al tratarse de ficheros muy grandes, se debe realizar mucho acceso al disco y por eso se requiere que sean de tipo NVMe.

En base a todas estas características, se decide que el número de nodos a adquirir con estas especificaciones sea de 3, lo cual viene determinado por el dinero presupuestado para la compra de los mismos.

2. 2 servidores de procesamiento para la reducción de datos:
 - 1 procesador de 36 cores con 72 hilos de ejecución SMT.
 - Mínimo 512 GB de memoria RAM ya instalada en 8 de los 16 slots, con posibilidad de ampliar hasta 2 TB.
 - Al menos 25 TB SSD NVME (2 discos SSD NVME 12.8 TB U.3 PCIe 4.0)
 - Al menos 40TB adicionales de capacidad de almacenamiento (2 discos 3.5" de 22TB SATA)
 - 1 unidades de red de dos puertos QSFP28 100Gb/s.

La existencia de dos servidores independientes de los nodos HPC también fue contemplada en la propuesta del proyecto, y cuyo propósito es la reducción de datos observacionales. Estos dos servidores serán utilizados por todo el equipo de SUL4LIFE que se conectarán a ellos de forma remota.

Los datos a tratar son ficheros muy grandes (~1 TB), procedentes de grandes interferómetros milimétricos (eVLA, ALMA, SKA), que se procesarán con programas específicos como CASA (<https://casa.nrao.edu/>) y GILDAS (<https://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/>). En base a la experiencia previa del equipo en la reducción de datos, al número de investigadores en el equipo (7-10 dependiendo del año de proyecto) y a las recomendaciones de los desarrolladores de los códigos, se ha establecido la configuración de procesador/tamaño de memoria RAM/especificaciones de almacenamiento listada anteriormente como la óptima dentro del presupuesto disponible. Además, la RAM debe ser instalada en 8 de los 16 slot que debe tener el servidor y la placa base debe ser capaz de soportar hasta 2TB, con el fin de que los equipos tengan capacidad de ampliación para adaptarse a cálculos más exigentes que se requieran en un futuro.

Estos servidores también serán utilizados para la creación de observaciones sintéticas a partir de las simulaciones realizadas en los servidores HPC, y su comparación con las observaciones

Ref.OTE 195/23. SUMINISTRO DEL SISTEMA DE COMPUTACIÓN PARA EL PROYECTO "THE TRAIL OF SULPHUR: FROM MOLECULAR CLOUDS TO LIFE (SUL4LIFE)". CENTRO DE ASTROBIOLOGÍA.

Versión formato del documento: 17.03.23

CSV : GEN-2d82-e822-1724-fd5d-9f4f-84eb-b81a-942b

DIRECCIÓN DE VALIDACIÓN : <https://portafirmas.redsara.es/pf/valida>

FIRMANTE(1) : FRANCISCO NAJARRO DE LA PARRA | FECHA : 19/02/2024 13:29 | Informa





MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES



Financiado por
la Unión Europea



European Research Council
Established by the European Commission



reales. Por lo tanto, deben estar conectados a los servidores HPC y al servidor de almacenamiento por redes de alta velocidad para permitir una eficiente transferencia de datos. Por esta razón, los servidores de procesamiento se colocarán en un rack en el centro de datos y conectados a los otros servidores mediante una red de 100Gbps.

3. El servidor para el almacenamiento masivo de datos, con lo siguiente:
 - 220 TB brutos de almacenamiento (sin tener en cuenta el espacio útil que implica el uso de RAID).
 - Capacidad de triplicar el espacio de almacenamiento con futuras ampliaciones.
 - 2 unidades de red con dos puertos QSFP28 100Gb/s.

Este servidor se utilizará para almacenar los resultados de las simulaciones, los productos del post-procesado de las mismas (observaciones sintéticas) y el almacenamiento de datos observacionales. La cantidad de espacio viene determinada por la cantidad de simulaciones que se espera realizar (unas 10 por año), así como del asesoramiento de otros grupos de investigación que trabajan en proyectos similares.

No obstante, al ser dicho volumen de datos una estimación, el servidor debe contar con la posibilidad de ampliación en caso de no ser suficiente, debiendo poder alcanzar al menos hasta el triple de la capacidad de almacenamiento adquirida inicialmente.

Debido al gran volumen de datos a mover, se necesita conexión de red de 100Gb/s con los otros servidores detallados anteriormente.

Se requiere que todos los servidores anteriores y los equipos para su administración incluyan a Red Hat Enterprise Linux 9.0 en su matriz de compatibilidad debido a que, por necesidades de compatibilidad con equipos ya existentes y del software a ejecutar, los equipos van a funcionar con el sistema operativo Linux.

Francisco Najarro de la Parra
Gerente en funciones del Centro de Astrobiología

Ref.OTE 195/23. SUMINISTRO DEL SISTEMA DE COMPUTACIÓN PARA EL PROYECTO "THE TRAIL OF SULPHUR: FROM MOLECULAR CLOUDS TO LIFE (SUL4LIFE)". CENTRO DE ASTROBIOLOGÍA.

Versión formato del documento: 17.03.23

CSV : GEN-2d82-e822-1724-fd5d-9f4f-84eb-b81a-942b

DIRECCIÓN DE VALIDACIÓN : <https://portafirmas.redsara.es/pf/valida>

FIRMANTE(1) : FRANCISCO NAJARRO DE LA PARRA | FECHA : 19/02/2024 13:29 | Informa

