

Servicios para el análisis de datos científicos en el PIC

Jornadas Técnicas de Rediris 2023

Zaragoza, Junio 2023

V. Acín Responsable de Operaciones en representación del PIC



Ciemot Centro de Investigaciones
Energéticas, Medioambientales
y Tecnológicas



- Introducción
- Participación en proyectos científicos
- PIC data center
- Servicios del PIC para el análisis de datos científicos
 - Computing
 - Storage
- Casos de uso: genómica y AI
- Conclusiones

El PIC fue creado en 2003 como un centro científico-tecnológico especializado en las tecnologías de gestión y análisis de datos.

- Participar en el proyecto LHC como centro de alto nivel (Tier1)
- Aprovechar sinergias y economías de escala para construir servicios escalables y robustos, comunes con diferentes actividades científicas
- Equipo multidisciplinar para poder cerrar la brecha entre las necesidades científicas y la infraestructura IT
- Colaboración con equipos de investigación para diseñar y construir arquitecturas para gestionar flujos de datos científicos



IFAE Institut de Física
d'Altes Energies



Cimat Centro de Investigaciones
Energéticas, Medioambientales
y Tecnológicas

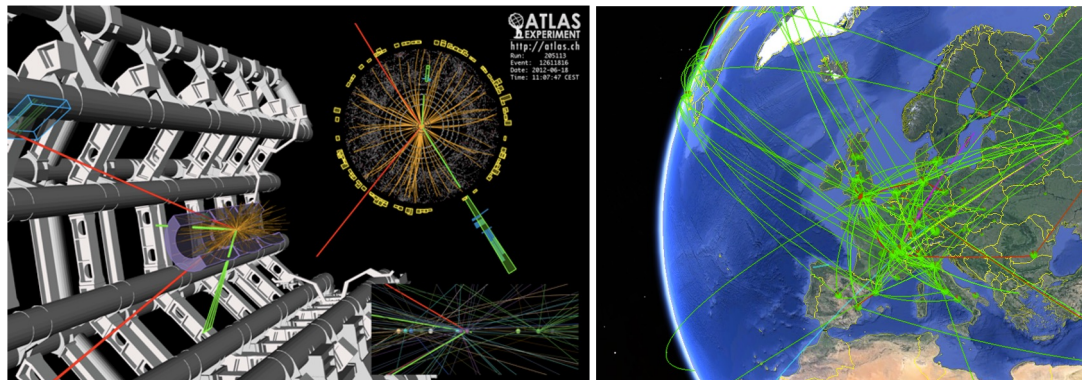
Large Hadron Collider

El PIC es uno de los 13 centros principales del sistema de procesamiento de datos del colisionador de partículas LHC del CERN, donde participan 170 centros de más de 40 países.

50 Petabytes generados anualmente que deben preservarse y analizarse con un incremento **x10** previsto para 2029.

El mayor sistema distribuido de datos científicos del mundo:

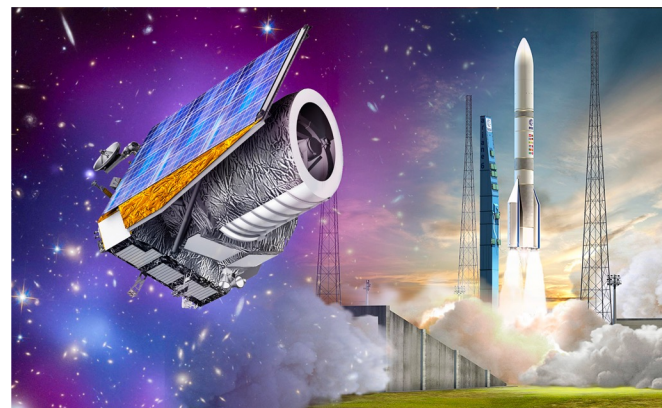
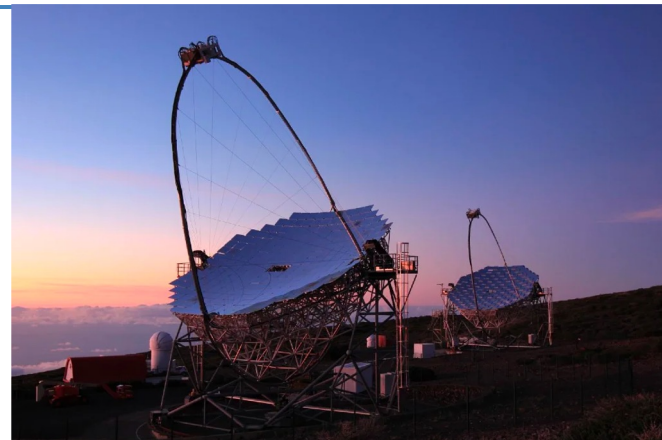
170 centros que suman 1 millón de CPUs para el análisis de 1 exabyte (un billón de Gigabytes) de datos



Grandes telescopios internacionales

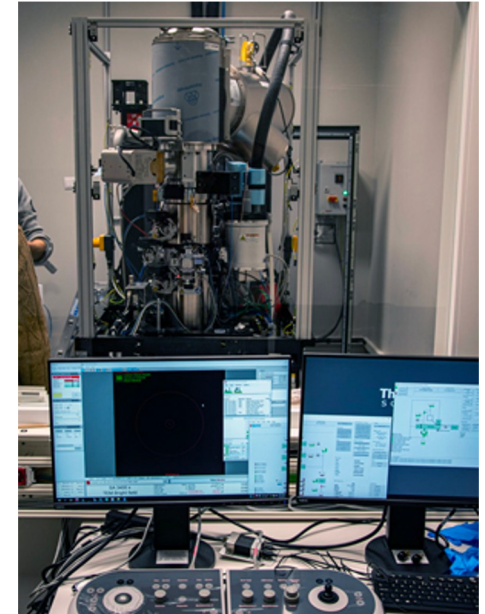
El PIC cuenta con una larga experiencia en gestión, análisis y preservación de datos de Cosmología:

- Desde 2009 somos el centro de datos principal de los telescopios **MAGIC** en el Observatorio del Roque de los Muchachos
- Desde 2013 formamos parte del **Euclid Consortium** de la ESA
 - ◆ El PIC es uno de los Science Data Centers
 - ◆ Lideramos la producción de catálogos sintéticos
 - ◆ Colaboramos en la producción de imágenes simuladas
 - ◆ **CosmoHub**: portal oficial de distribución de simulaciones
- Desde 2022, nos convertimos en uno de los 4 datacenters de **CTA Observatory**, proyecto incluido en el **ESFRI Roadmap**



Colaboraciones con centros de excelencia así como hospitales para facilitar y contribuir a sus investigaciones:

- **Sincrotón ALBA, ICN2** y **ICMAB**: construcción de un centro de procesamiento y análisis de datos de la futura plataforma de microscopios para el estudio de materiales avanzados. Proyecto InCAEM. *Plan Complementario (NextGen/Generalitat)*
- **ICFO** y **VHIR**: despliegue de un sistema de análisis de datos de bioimagen de alta resolución DIGITAL-RETINA. *Plan Nacional I+D+i*
- **UAB**: colaboración con proyectos de **genómica**, **ciencias ambientales** y **superconductividad** para acelerar sus procesos de investigación
- **Hospital Parc Taulí**: soporte a investigadores para desplegar servicios de análisis de datos genómicos en el PIC



MAPA DE INFRAESTRUCTURAS CIENTÍFICAS Y TÉCNICAS SINGULARES



UNIÓN EUROPEA
Fondo Europeo de Desarrollo Regional

Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia



GALICIA
RES - Finis Terrae (CESGA)
FLOTA - CSIC/IEO
NANBIOSIS - CIBER-BBN



Centro Nacional de Investigación sobre la Evolución Humana (CENIEH)
Centro de Láseres Pulsados (CLPU)
RES - Caléndula (SCAYLE)



COMUNIDAD DE MADRID
Laboratorio Nacional de Fusión (LNIF)
Red Académica y de Investigación Española (RedIRIS)
RES-Cibeles (UAM)
RES-Xula (CIEMAT)
NANBIOSIS - CIBER-BBN
ReDIB - BIOIMAC (UCM)
MARHIS - CEHIPAR
R-LRB - LMR
MICRONANOFABS - CT-ISOM
ELECMI - CNME
RLASB - CISA
ReDIB - TRIMA-CNIC
IABA-Centro de Microanálisis de Materiales (CMAM)



CANARIAS
Plataforma Océánica de Canarias (PLOCAN)
Observatorios de Canarias (OCC)
Gran Telescopio CANARIAS (GTC)
RES - La Palma (IAC)
MARHIS - PLOCAN-TS



CANTABRIA
RES - Altamira (UC)
MARHIS - GTIM-CCOB



EUSKADI
ReDIB - CIC biomagUNE
NANBIOSIS - CIBER-BBN
MARHIS - BIMEP
R-LRB - LRE



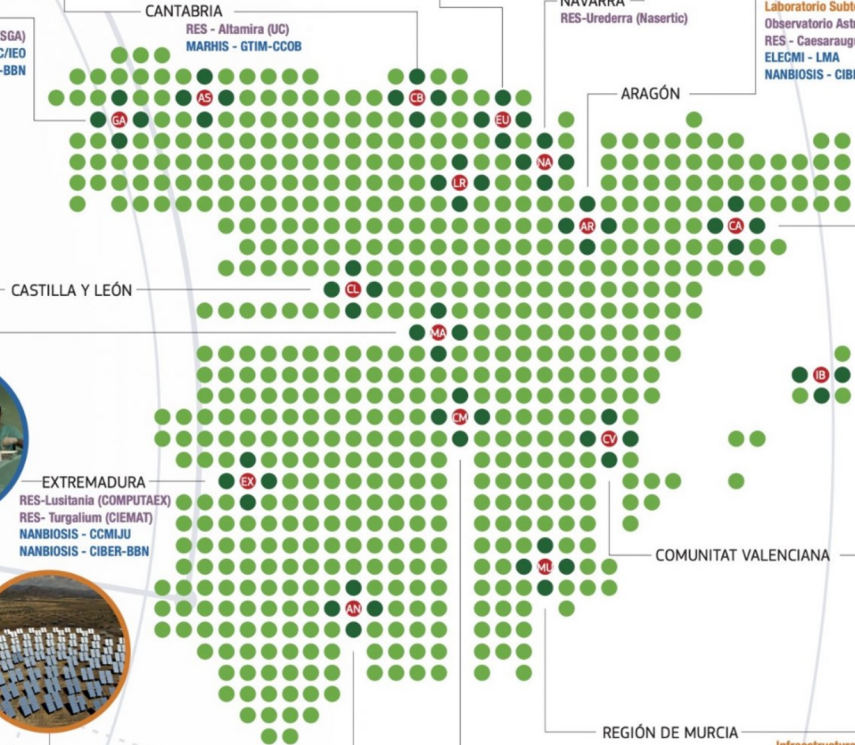
NAVARRA
RES-Urederra (Nasertic)



Laboratorio Subterráneo de Canfranc (LSC)
Observatorio Astrofísico de Javalambre (OAJ)
RES - Caesaraugusta (UNIZAR)
ELECMI - LMA
NANBIOSIS - CIBER-BBN



Sincrotrón ALBA
RES - Marestrum y MinoTauro (BSC-CNS)
RES - BSC (BSC-CNS)
RES- PIC (CIEMAT-IFAE)
RES - BSC
MICRONANOFABS - SBCNM
MARHIS - ICIEM
OmicsTech - CNAG - CRG
OmicsTech - COS
RLASB - CReSA
NANBIOSIS - CIBER-BBN
ELECMI - UMEAP
FLOTA - CSIC



CASTILLA Y LEÓN

EXTREMADURA
RES-Lusitania (COMPUTAEX)
RES- Turgalium (CIEMAT)
NANBIOSIS - CCMIJU
NANBIOSIS - CIBER-BBN

ANDALUCÍA
Reserva Biológica de Doñana (RBD)
Plataforma Solar de Almería (PSA)
Observatorio Astronómico de Cala de Icaña (OAI)

CASTILLA - LA MANCHA
Observatorio de Yeves

REGIÓN DE MURCIA

Infraestructura para el Cultivo del Atún Rojo (ICAR)
FLOTA - BIO Hespérides

ARAGÓN

CATALUÑA

ILLES BALEARS
Sistema de Observación Costero de las Illes Balears (SOCIB)
FLOTA-CSIC/IEO




COMUNITAT VALENCIANA
RES - Tirant (UV)
MICRONANOFABS - NF-CTN
NANBIOSIS - CIBER-BBN
ReDIB - Imaging La Fe



Centro de datos

- Ubicado en el edificio de Serveis Informàtics UAB
- Sala principal de 150 m² climatizada con freecooling adiabático (renovado 2014-2016)
 - Equipos de disco, cinta y nodos de procesamiento
- 25 m² liquid immersion cooling desde 2016
 - Nodos de procesamiento

200 Gbps de conectividad a la red científica a través de CSUC-RedIRIS

- Uno de los centros con mayor transferencia de datos de la red científica con 100PB in+out por año
- Circuitos privados para proyectos



Computing, procesamiento de datos y análisis

- Batch processing: 12000 CPU cores, 18 GPUs
 - Gestionado con [HTCondor](#)
- Análisis interactivo: [JupyterHub](#)

Almacenamiento

- Cinta: 63 PB cinta (Enstore)
- Disco: 20PB (dCache), 500TB (NFS), 3PB (Ceph)

NEW

Big Data - Hadoop

- [CosmoHub](#)
- 3rd gen hadoop cluster: 144 cores / 1.5TB RAM / 430TB HDD
- 4th gen hadoop cluster: 720 cores / 15TB RAM / 4.3PB HDD

NEW

Consultoría científico-técnica

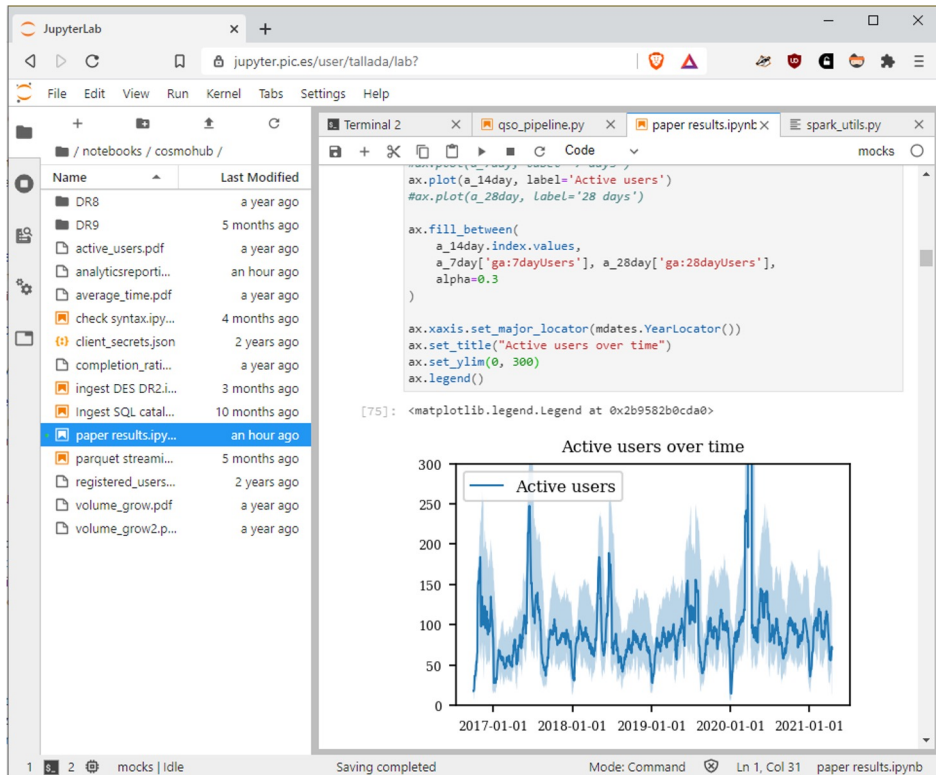


Batch processing: HTCondor

- Sistema de batch para High Throughput Computing (HTC)
- Gestionamos tanto los jobs grid (LHC, CTA, etc.) con jobs de usuarios locales
- HTCondor escala con miles de jobs y de recursos a la vez
- Los experimentos del LHC del PIC (Atlas, CMS y LHCb) utilizan recursos grid (ARC-CEs) y HTCondor para enviar jobs al Marenostrum del BSC



Interactive analysis: JupyterHub



The screenshot displays the JupyterLab interface. On the left, a file browser shows a directory structure with files like 'active_users.pdf', 'analyticsreporti...', 'average_time.pdf', 'check_syntax.ipyn...', 'client_secrets.json', 'completion_rati...', 'ingest DES DR2i...', 'ingest SQL catal...', 'paper results.ipynb', 'parquet streami...', 'registered_users...', 'volume_grow.pdf', and 'volume_grow2.p...'. The 'paper results.ipynb' file is selected. The main area shows a code editor with the following Python code:

```
ax.plot(a_14day, label='Active users')
#ax.plot(a_28day, Label='28 days')

ax.fill_between(
    a_14day.index.values,
    a_7day['ga:7dayUsers'], a_28day['ga:28dayUsers'],
    alpha=0.3
)

ax.xaxis.set_major_locator(mdates.YearLocator())
ax.set_title("Active users over time")
ax.set_ylim(0, 300)
ax.legend()
```

The output of the code is a line chart titled "Active users over time". The x-axis represents time from 2017-01-01 to 2021-01-01, with major ticks every year. The y-axis represents the number of active users, ranging from 0 to 300. The chart shows a highly volatile blue line representing "Active users" over the five-year period.

Servicio de Jupyter notebooks integrado en la infraestructura base

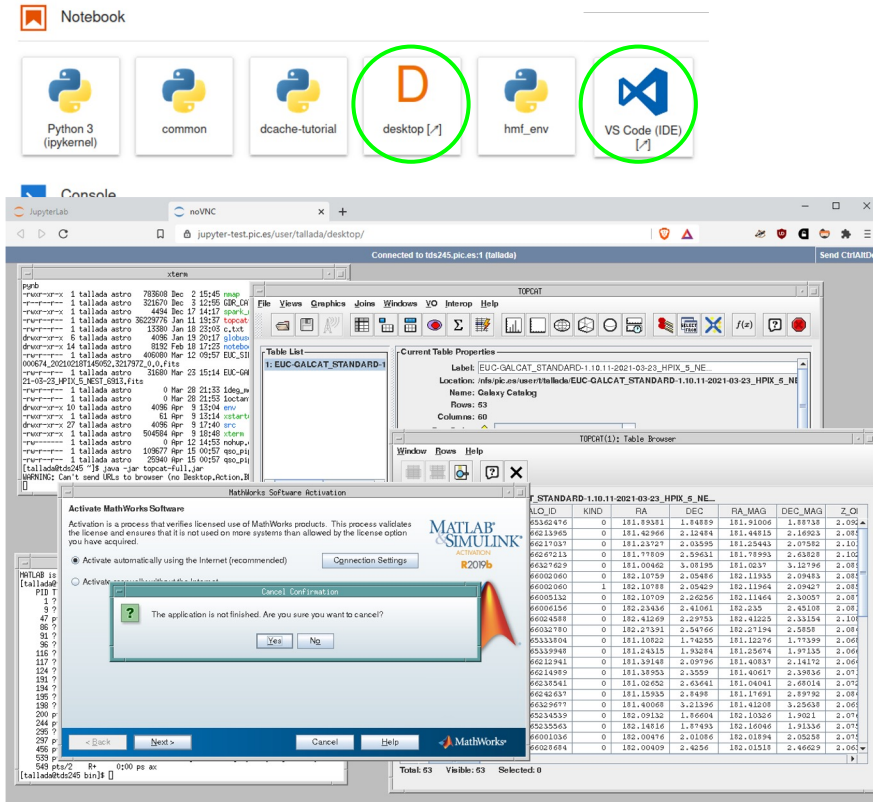
- Notebooks en HTCondor
- Acceso a los recursos de almacenamiento

Perfil de tarea flexible según necesidades del usuario

- Alta memoria
- Multicore
- GPU

Perfil de alta prioridad para garantizar interactividad

Interactive analysis: JupyterHub



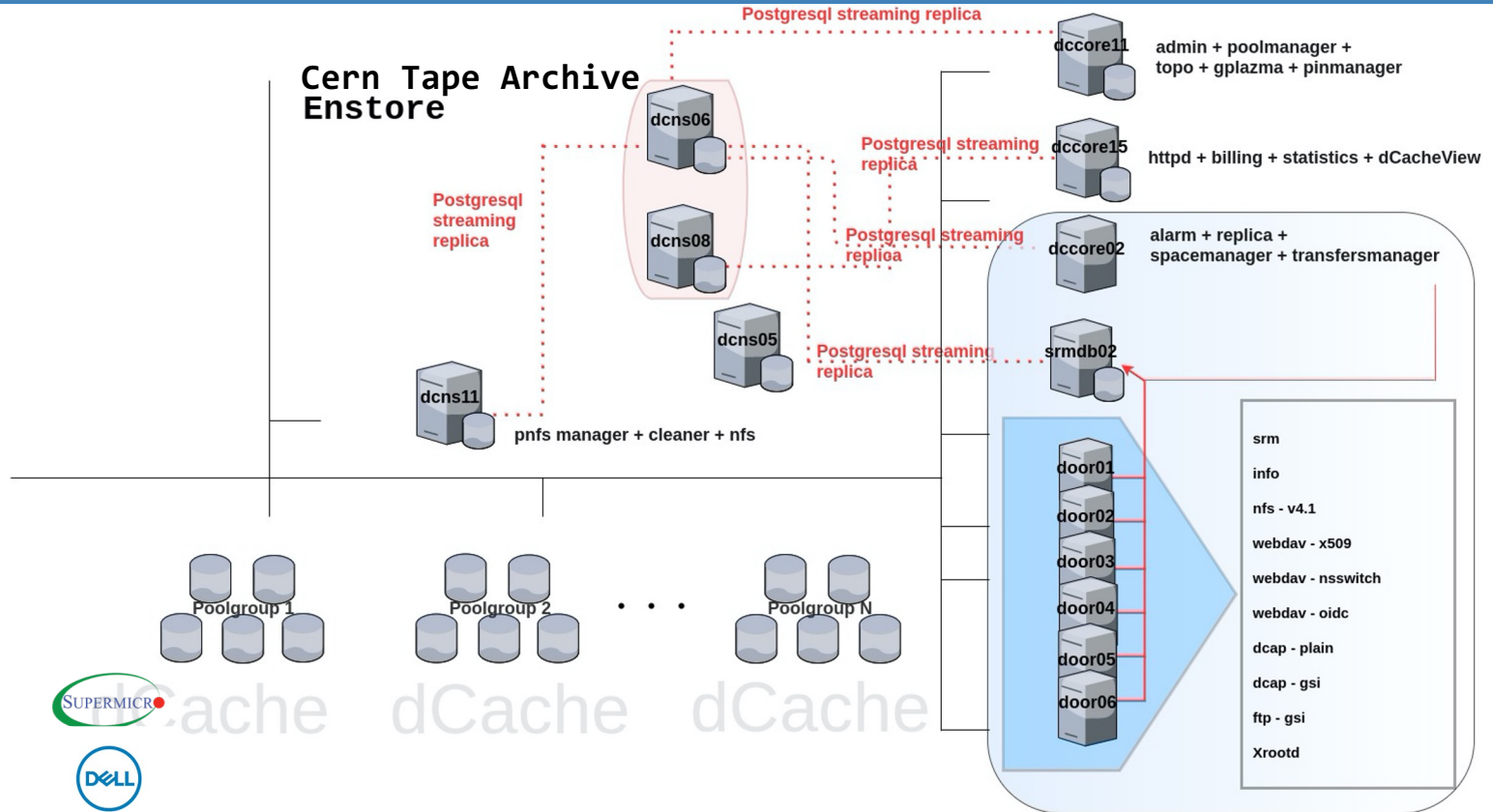
Entorno de conda preconfigurado con la mayoría de paquetes y extensiones de JupyterLab estándar

Gestión y actualización del servicio automatizada con puppet y gitlab CI/CD

Aplicaciones adicionales

- Desktop remoto
- IDE VSCode
- Integración con Dask

Mass storage: dCache



Big data - Hadoop - CosmoHub

Servicio Big Data

- Basado en  **hadoop**
- Almacenamiento y procesado distribuidos
 - Sobre infraestructura "commodity"
 - Escala linealmente hasta miles de nodos
- Tolerante a fallos
 - Servicios redundados sin puntos únicos de fallo

Plataforma de cuarta generación

- 30 nodos
 - 24 cores / 512 GiB RAM
 - 12 HDD x 12TB SATA / 2 NVMe x 1TB
 - 2 x 25 GbE
- Distribución Hadoop propia
 - Basada en Docker
 - Hadoop 3.2.3 / Hive 3.1.2 / Spark 3.1.2
 - Integrada con Kerberos + FreeIPA

CosmoHub

- Exploración y distribución interactiva de datos cosmológicos masivos
- Múltiples proyectos
 - PAUS, MICE, Euclid, DES, DESI, Magic, ...
- 60 TiB datos, >100 catálogos
- >1500 usuarios registrados, ~150 activos mensuales

Características

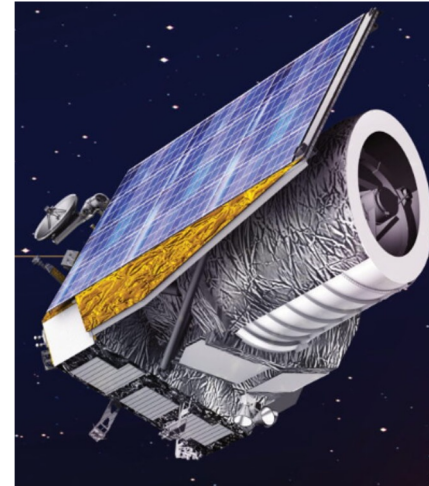
- Interfaz simple y guiada (no necesita SQL)
- Histogramas 1D y Heatmaps 2D
 - Permite subsampling rápido
 - Sin límite temporal o de volumen
- Construcción de subcatálogos personalizados
 - Soporta CSV, FITS, ASDF y Parquet
- Extensión via UDFs
 - HEALPix, arrays, ADQL

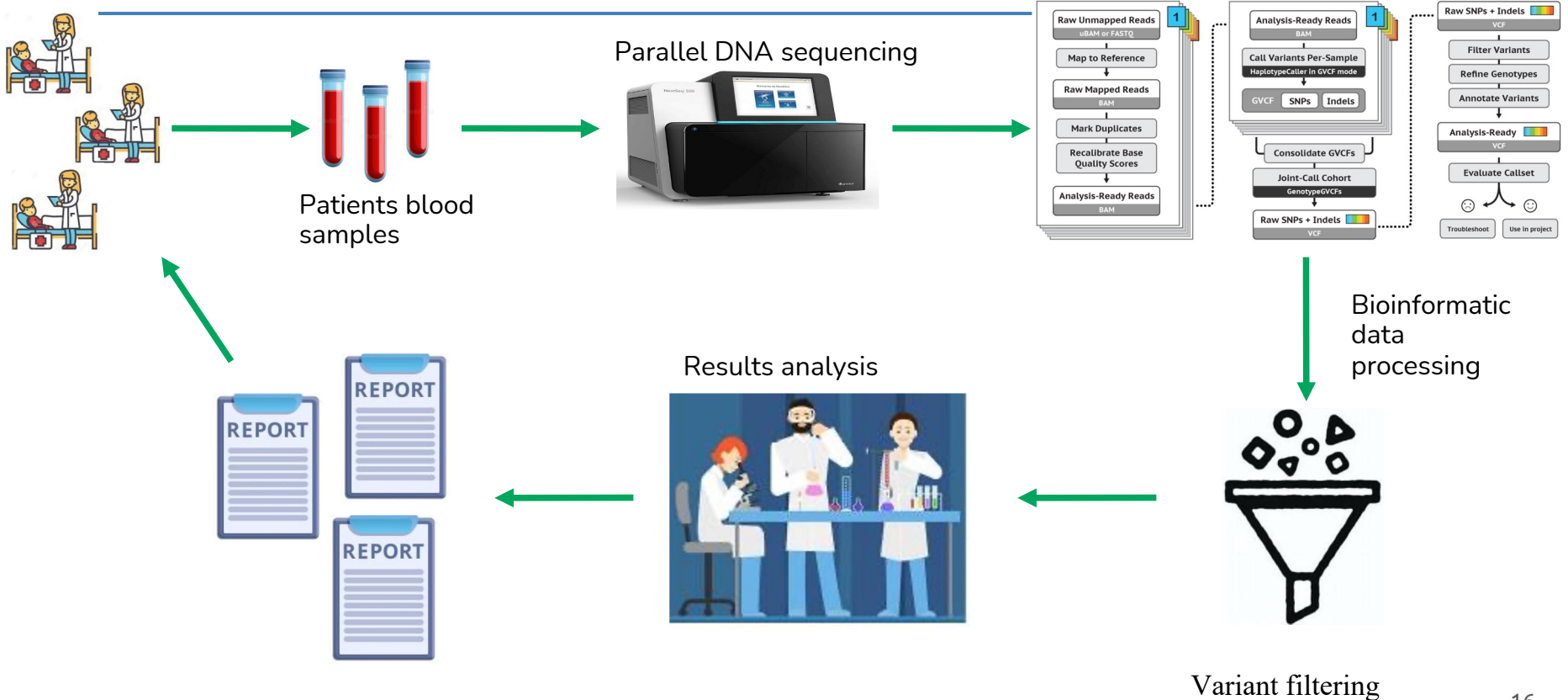
Rendimiento

- >75% de todos los catálogos tardan <3 min
- "Preemption" para asegurar la interactividad

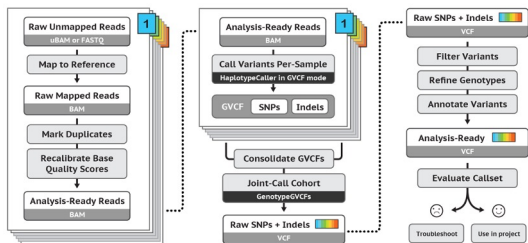
Casos de uso

- Dos casos de uso del PIC por proyectos de diferentes ámbitos científicos, más allá de los grandes experimentos internacionales.
 - **Genómica.** Laboratorio de Señales del Hospital Universitario Parc Taulí.
 - **Applied AI.** Nuevo grupo interno. Ámbito interdisciplinario.

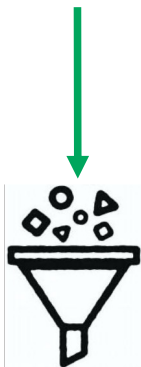




Aceleración de resultados



Bioinformatic data processing



Variant filtering

Antes

- Datos analizados secuencialmente. No era posible realizar ejecuciones simultáneas
- Limitaciones en la implementación de nuevos workflows de análisis de datos
- Para el estudio de 10 pacientes, se requieren 2 semanas de procesamiento y filtrado de datos

Ahora

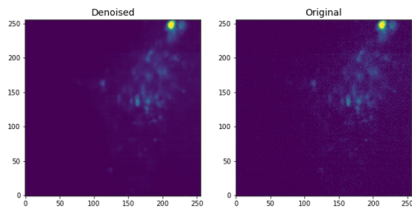
- Datos analizados en paralelo. Ahora es posible realizar análisis simultáneos.
- Facilidad para repetir análisis de datos cuando se implementan nuevas funciones.
- Para el estudio de 10 pacientes, se requieren 2 días de procesamiento

- Nuevo grupo de IA con 3 personas
- Àmbit interdisciplinari
- Colaboración cercana con diferentes grupos científicos

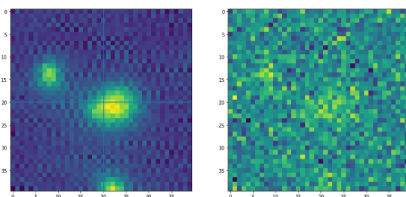
Day 6 - Image segmentation and object detection

Martin Eriksen, Laura Cabayol

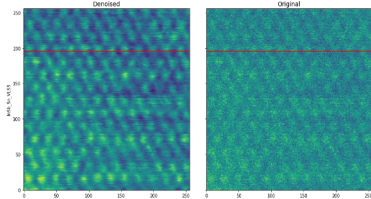
Curso de IA



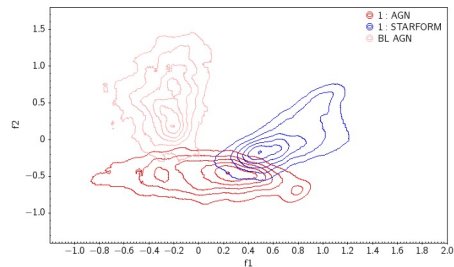
Digital retina (ICFO)



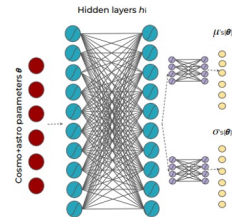
Cartografía de galaxias



Ciencia de materiales (In-CAEM)



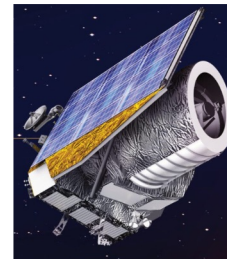
Evolución de galaxias



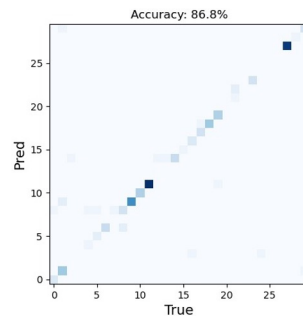
Emuladores cosmológicos



Quantum machine learning (QML).



Euclid weak lensing



Arqueología 18

El PIC es un centro científico-tecnológico especializado en análisis de datos que aporta un valor singular al sistema de investigación.

- Es una infraestructura reconocida dentro del Mapa ICTS del MICINN como nodo de la Red Española de Supercomputación, y operada mediante un convenio de colaboración entre IFAE y CIEMAT
- La actividad se desarrolla mediante estrechas colaboraciones con grupos de investigación y centros tecnológicos nacionales e internacionales
- Ofrece servicios de procesamiento de datos en batch e interactivo (12k CPUs), almacenamiento en disco (> 23 PB) y cinta (63 PB), big data (Cosmohub) y consultoría científico-tecnológica
- La experiencia en abordar los retos tecnológicos de los grandes experimentos internacionales, como la física de partículas y la astrofísica, se aplica exitosamente a experimentos de otras disciplinas científicas como la bioinformática y el estudio de materiales
- Tiene la capacidad de captar fondos competitivos para infraestructuras e investigación, que complementan la financiación basal que garantiza las operaciones

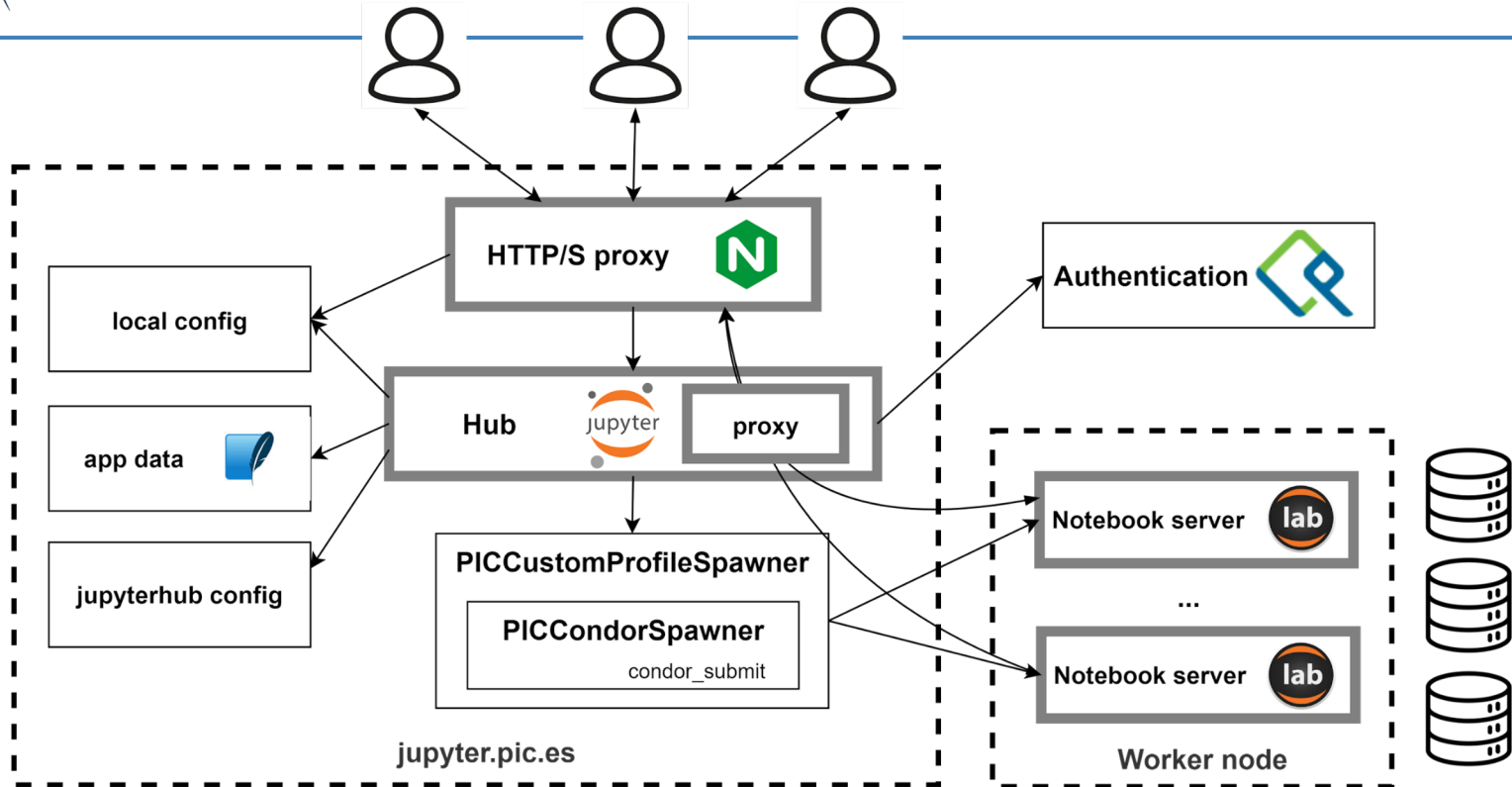


Gracias por vuestra atención
vacin@pic.es



BACKUP SLIDES

JupyterHub - esquema del servici



JupyterHub - DASK integration

