

De la infraestructura a la investigación: conectando GLUON y GRAVITON con la ciencia

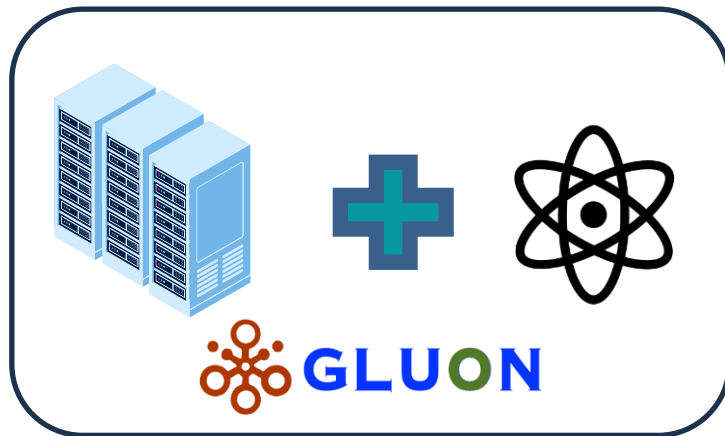
Miguel G. Folgado

Instituto de Física Corpuscular (IFIC)
Jornadas Tecnológicas IFIC 2025



Sobre Mi

- Doctorado en Física Teórica en el IFIC (2016 - 2021).
- 4 Años de experiencia postdoctoral trabajando en proyectos relacionados con Inteligencia Artificial.
- Actualmente estoy bajo un contrato Postdoctoral del programa Momentum del CSIC.



IRT

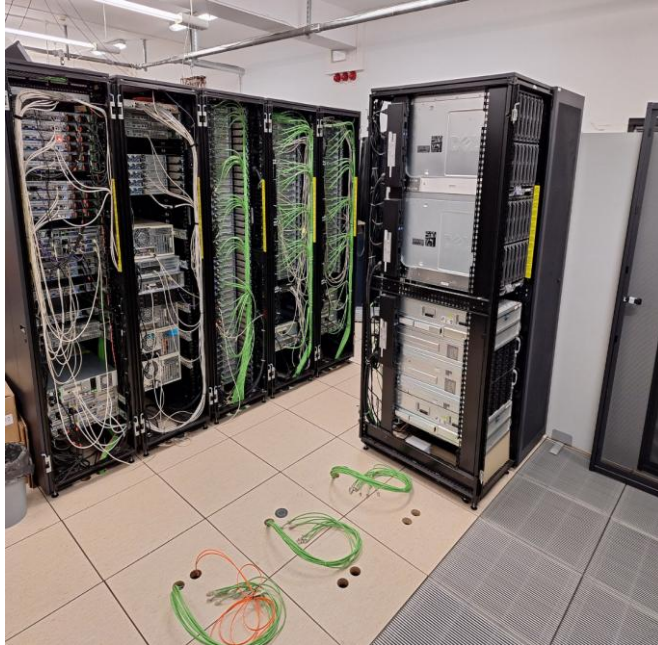
Implementación de estrategias avanzadas para la administración de la infraestructura de cálculo general del IFIC (GLUON)

Contrato Postdoctoral de 4 años: Soporte a los proyectos de investigación en el uso de la infraestructura de cálculo GLUON:

- Preparación de entornos de computo adecuados para la programación científica.
- Propiciar un uso eficiente de la infraestructura: Monitorización de actividad, análisis de métricas de uso, etc.
- Facilitar el uso de la infraestructura a los grupos de investigación: Elaboración de documentación, casos de uso, tutoriales, etc.



De la infraestructura a la ciencia



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



UNIVERSITAT
DE VALÈNCIA



Montaje



Configuración



Gestión

Nuestra CPD, el corazón computacional del IFIC



Nuestra CPD, el corazón computacional del IFIC



IFIC General Computing Infrastructure



Flavour and Origin of Matter
Sabor y Origen de la Materia

Storage

Nodes

CPU

GPU

361 TB

37

2,008

53



848 TB

26

2,592

N/A



6 PB

74

3,256

N/A



418 TB

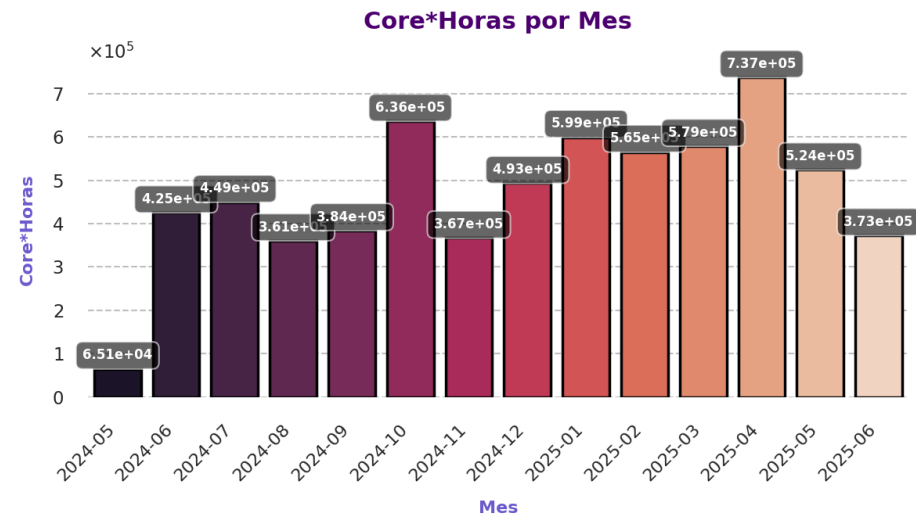
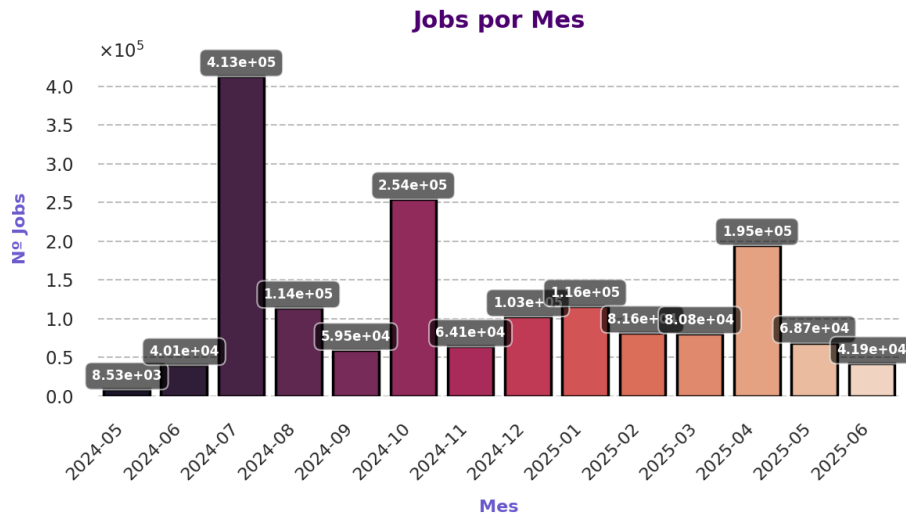
23

1,368

N/A



Uso eficiente de la infraestructura



- Actualmente contamos con 110 cuentas activas.
- Generamos estadísticas periódicas sobre:
 - Uso de **cores·horas** por mes.
 - Número de **jobs** lanzados por mes.
- Medición también a nivel de grupos de investigación, para:
 - Evaluar la carga de trabajo de cada línea científica.
 - Ajustar y validar las **quotas de uso**, asegurando un reparto lo más justo posible.



Fairshare en HTCondor (El scheduler de GLUON)

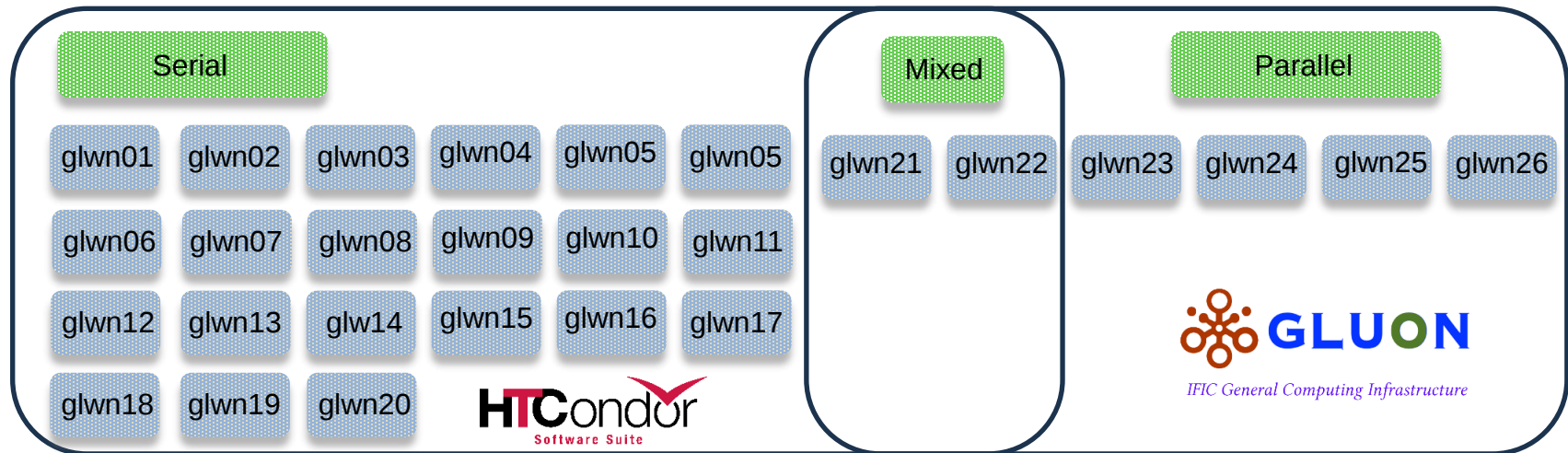
- Se emplea el sistema de *fairshare* para ajustar prioridades.
- En caso de competencia y cluster lleno:
 - Se revisa el histórico de jobs por usuario y grupo.
 - Las prioridades se ajustan dinámicamente para garantizar un reparto justo.

Cluster con hueco disponible

- Si hay recursos libres, los usuarios pueden ejecutar inmediatamente, independientemente de su histórico de uso.

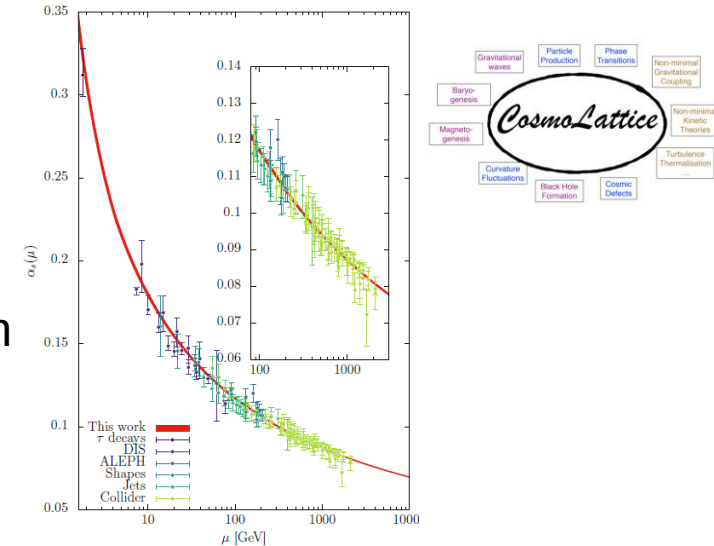
Distribución de Quotas Almacenamiento

- Además de las quotas personales (iguales para todos los usuarios), contamos con un sistema de almacenamiento de gran capacidad diseñado para atender las necesidades específicas de cada grupo de investigación.
- Las quotas de este espacio se han definido tras analizar en detalle los requisitos de cada línea de investigación del IFIC, garantizando un reparto justo y adaptado a sus proyectos científicos.



- Tras estudiar las necesidades computacionales de los distintos grupos de investigación y realizar pruebas con diferentes softwares científicos, se optó por HTCondor, ya que la mayoría de los trabajos requieren pocos cores pero en gran volumen. La prioridad es maximizar el número de jobs finalizados en el menor tiempo posible (HTC).
- Reservamos unos pocos nodos para computo en paralelo para aquellas líneas de investigación que requieren un mayor número de cores/trabajo.

- Equipos orientados al cálculo científico en proyectos de Lattice QCD, CosmoLattice y distintas variantes de estas metodologías.
- De forma general, demandan alta paralelización y el uso de numerosos nodos o núcleos de cómputo por cada ejecución.



Serial

wn01

wn02

wn03



Parallel

wn04

wn05

wn06

wn07

wn08

wn09

wn10

wn10

wn11

wn12

wn13

lwn14

wn15

wn16

wn17

wn18

wn19

wn20

wn21

wn22

wn23

wn24

Serial

glwn01	glwn02	glwn03	glwn04	glwn05	glwn05
glwn06	glwn07	glwn08	glwn09	glwn10	glwn11
glwn12	glwn13	glwn14	glwn15	glwn16	glwn17
glwn18	glwn19	glwn20			

Mixed

glwn21	glwn22
--------	--------

Parallel

glwn23	glwn24	glwn25	glwn26
--------	--------	--------	--------



Serial

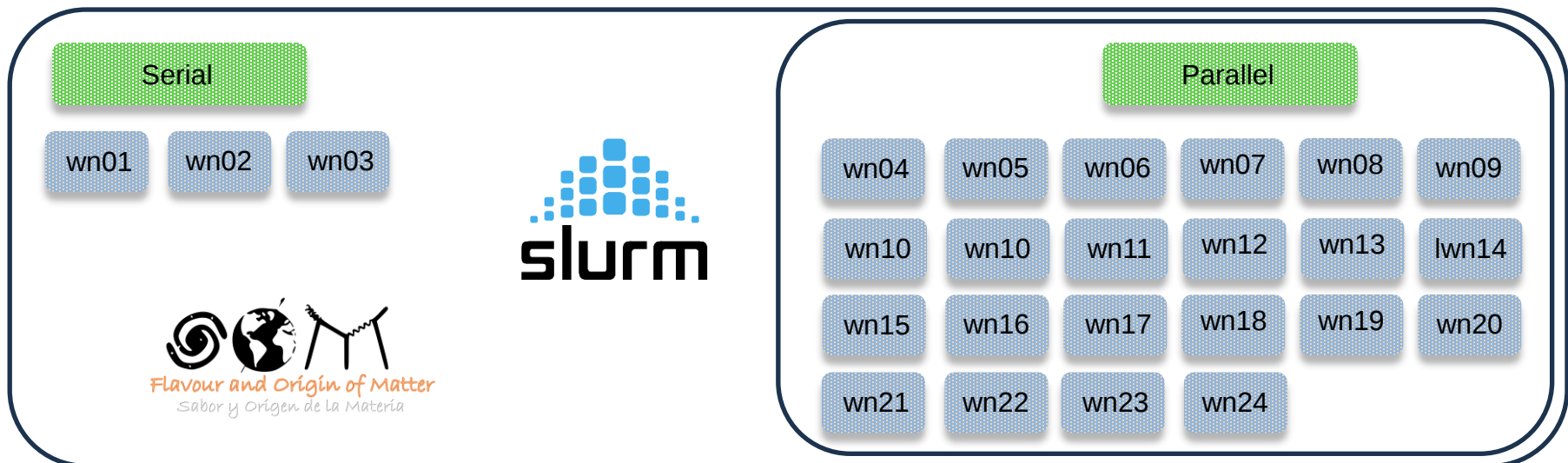
wn01	wn02	wn03
------	------	------



Parallel

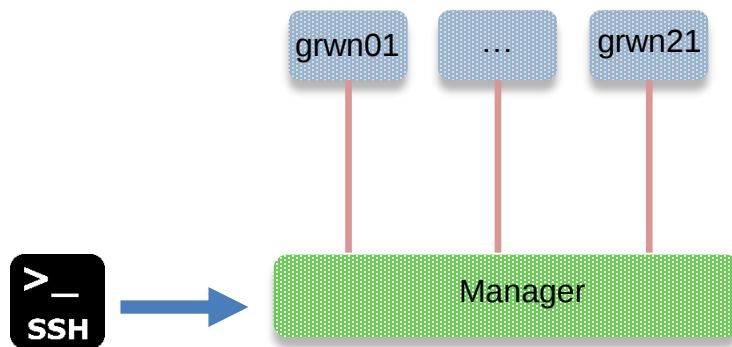
wn04	wn05	wn06	wn07	wn08	wn09
wn10	wn10	wn11	wn12	wn13	wn14
wn15	wn16	wn17	wn18	wn19	wn20
wn21	wn22	wn23	wn24		

- Situación opuesta a GLUON: el número de jobs es mucho menor, pero cada uno requiere un gran número de núcleos (varias máquinas en paralelo). Tras un análisis detallado, concluimos que HTCondor no resultaba eficiente para este tipo de cargas de trabajo.
- Tras un análisis comparativo de distintas soluciones, determinamos que Slurm se adaptaba mejor a las necesidades de estos cálculos científicos, proporcionando una gestión más eficiente de los recursos y un rendimiento óptimo en trabajos altamente paralelizados.

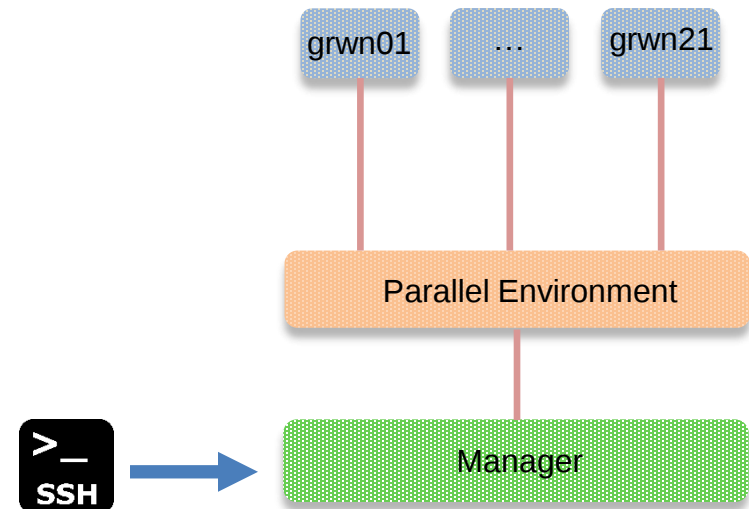




HTC: Trabajos que emplean un único nodo de cálculo



HPC: Trabajos que emplean multiples nodos de cálculo a la vez





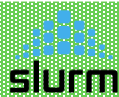
Metrics



LDAP

User Acces
gruiXX.ific.uv.esUser Acces
gluiXX.ific.uv.es

Compute



Compute



Software Layer



MPI

CernVM
File system

lustre

SOM storage

Group Projects

/lhome

Management Layer

ANSIBLE



Kickstart



Entornos de computo científico

El entorno de computo es un entorno Linux basado en códigos open source. Utilizamos Alma Linux 9 (binario compatible de RedHat 9 mantenido por la comunidad libre).

En Junio del 2025 terminamos la migración desde Centos 7 a Alma Linux 9. Todos nuestros clusters de computo funcionan ya bajo esta distribución.



Compiladores

Tras analizar las necesidades de los grupos de investigación, hemos preparado entornos con compiladores actualizados y estables, que permiten tanto el desarrollo de nuevos proyectos como la ejecución de códigos científicos ya consolidados.



Paralelización y comunicación

Ofrecemos entornos optimizados que permiten escalar desde un único nodo hasta decenas de nodos conectados por InfiniBand.

- Interfaz de paso de mensajes (MPI) sobre InfiniBand (Multinodo).
- Memoria compartida (Mononodo).



OpenMP

Entornos de computo científico

Algebra lineal y Cálculo Numérico

Las librerías de cálculo Matricial han sido cuidadosamente seleccionadas en función de los proyectos del instituto. Forman la columna vertebral de la simulación numérica en HEP.



I/O Científico y Almacenamiento

Del mismo modo, tenemos el entorno preparado para el tratamiento de grandes volúmenes de datos. Cubriendo las necesidades de diferentes líneas de investigación (LCH, Astrofísica, etc).



Entornos para Análisis de Datos

Hemos integrado entornos diversos intentando cubrir todas las necesidades del instituto. Actualmente ofrecemos un ecosistema flexible y reproducible que permite a los investigadores adaptar sus flujos de trabajo de forma ágil.



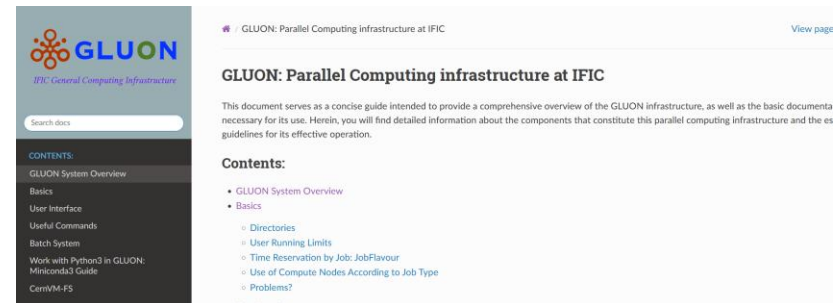
Elaboración de documentación específica y tutoriales

- Documentación estructurada con estándares actuales: elaborada con Sphinx y publicada en Read the Docs para facilitar su consulta y mantenimiento.
- Descripción detallada de la infraestructura, con el fin de garantizar la reproducibilidad de los resultados obtenidos por los diferentes proyectos.
- Casos de uso reales: ejemplos prácticos con y sin MPI, adaptados a los proyectos del IFIC.
- Tutoriales específicos: desde la creación de entornos en Python, hasta el uso de CVMFS y otras herramientas clave.

<https://som.ific.uv.es/grdocs>



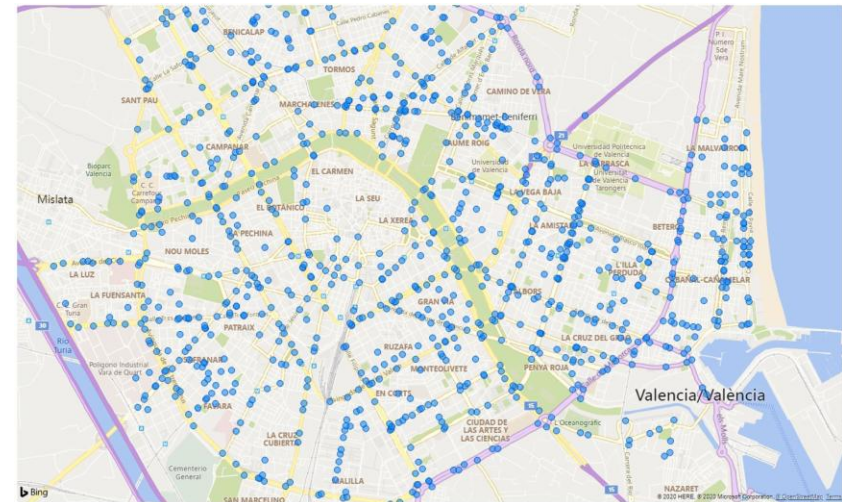
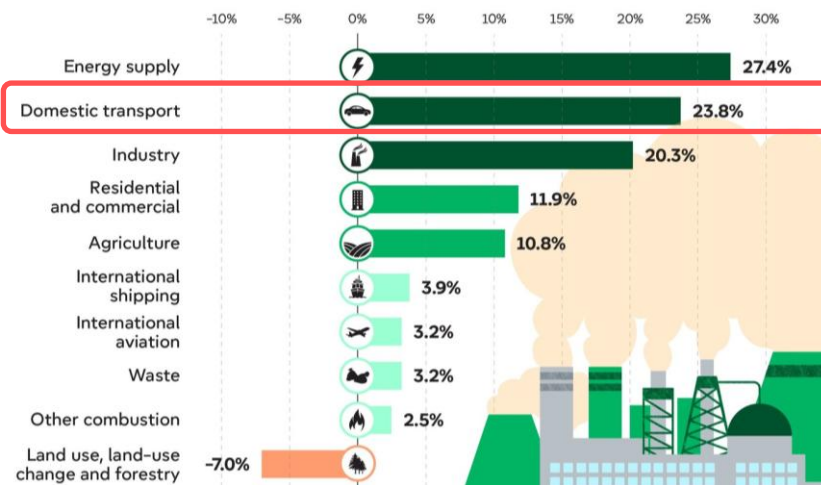
<https://gluon.ific.uv.es>



El objetivo es reducir barreras de entrada y garantizar que cada investigador pueda aprovechar al máximo la infraestructura desde el primer día.

También usuario de la infraestructura!

- El objetivo del estudio es reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y mejorar la calidad del aire en ciudades mediante la predicción de picos de tráfico
- Para ello usamos algoritmos de ML sobre datos de flujo de tráfico de la ciudad de Valencia. Si somos capaces de predecir con suficiente antelación los excesos de tráfico, podemos tomar medidas para reducirlos!



Valencia es una de las ciudades mas sensorizadas de Europa



Variables utilizadas:

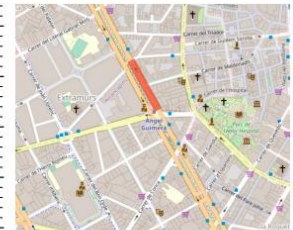
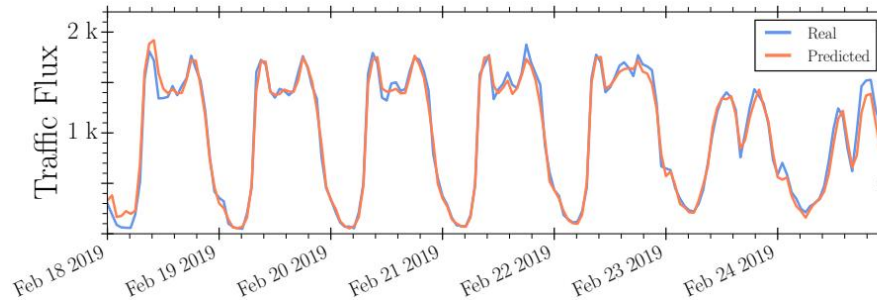
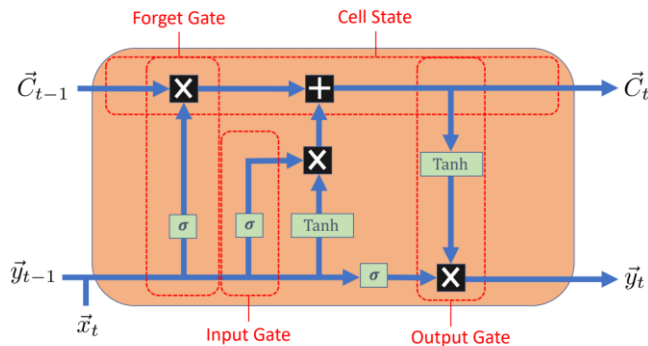
- Datos de flujo de tráfico (intensidad, saturación, restricciones temporales).
- Variables climatológicas (temperatura, humedad, precipitaciones), clave para mejorar la predicción.

Algoritmos empleados:

- LSTM (redes recurrentes para series temporales).
- XLSTM (extensión optimizada, mayor capacidad de capturar dependencias largas).

Precisión y cobertura:

- Predicciones con una precisión en torno al 85–90%.
- Capacidad de predicción en decenas de tramos urbanos de la ciudad de Valencia.



- **Towards Predictive Pollution Control Through Traffic Flux Forecasting With Deep Learning: A Case Study in the City of Valencia**

Miguel G. Folgado, Verónica Sanz, Johannes Hirn, Edgar G. Lorenzo, Javier F. Urchueguia
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aii2.106>

- **Deep learning for urban air quality: a traffic-based prediction and alert system for Valencia**

Miguel Folgado, Verónica Sanz, Johannes Hirn, Edgar Lorenzo-Saez, Javier Urchueguia
<https://doi.org/10.1007/s00521-025-11316-0>

- **Methodology development for high-resolution monitoring of emissions in urban road traffic systems**

Lorenzo Saez, Edgar ; Urchueguia Schölzel, Javier Fermín ; **García Folgado, Miguel ;**
Oliver Villanueva, Jose Vicente
<https://doi.org/10.1016/j.apr.2025.102600>