Proyecto PID2020-119715GB-I00 financiado por:

PLIEGO DE PRESCRIPCIONES TÉCNICAS PARA LA CONTRATACIÓN DEL SUMINISTRO, INSTALACIÓN Y PUESTA EN FUNCIONAMIENTO DE LA AMPLIACIÓN DEL CLÚSTER DE COMPUTACIÓN DE ALTAS PRESTACIONES DEL GRUPO DE BIOLOGÍA COMPUTACIONAL Y BIOMEDICINA DE SISTEMAS DEL IIS BIODONOSTIA MEDIANTE PROCEDIMIENTO ABIERTO

1. OBJETO DEL CONTRATO

El presente contrato tiene por objeto el suministro, instalación y puesta en funcionamiento de la ampliación del clúster de computación de altas prestaciones del Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas del IIS Biodonostia.

Expediente: 2023-01/SUM

2. DESCRIPCIÓN DEL SUMINISTRO OBJETO DE CONTRATO

El Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas del IIS Biodonostia ha sido financiado en las siguientes convocatorias para las tareas indicadas a continuación:

- Convocatoria Future Emerging Tecnologies (FET) de la Unión Europea: para realizar el proyecto Circular Vision "**Circular DNA in diagnosis and disease models**" (899417). En dicho proyecto, el Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas se encarga del desarrollo de algoritmos y del análisis de la cantidad masiva de datos generados por los miembros del consorcio Europeo. Para ello se requiere el suministro, instalación y puesta en funcionamiento de la ampliación de su clúster de computación de altas prestaciones.
- Convocatoria financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MINECO) de «proyectos De I+d+i» en el Marco de los Programas Estatales de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico Del Sistema De I+d+i y de I+d+i Orientada a los Retos de la Sociedad para realizar el proyecto "**Descubrimiento de las palabras epigenéticas de la regulación celular mediante el desarrollo de algoritmos computacionales de análisis de datos epigenómicos**" (PID2020-119715GB-I00): en dicho proyecto, el Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas se encarga del desarrollo de algoritmos y del análisis de la cantidad masiva de epigenómicos descargados de bases de datos. Para ello se requiere la renovación de su clúster de computación de altas prestaciones.

Para lo anteriormente expuesto es necesaria la adquisición, instalación y puesta en funcionamiento de equipamientos High Performance Computing (HPC) que permita la ampliación del clúster de computación ya existente que permita el análisis de grandes cantidades de datos de Circulqr DNA mediante la implementación de algoritmos de computación en paralelo.

Por ello, se considera necesaria la adquisición de equipo HPC para que tenga las siguientes características técnicas:

- Nodos de computación CPU compartibles con la estructura computacional HPC existente basada en sistemas Ladon. Nodos GPU, memoria principal almacenamiento HDD y SSD también compatible con la con la estructura computacional HPC.
- Nodos de computación CPU y CPU compartibles con la estructura computacional HPC existente basada en sistemas Ladon. Memoria principal almacenamiento HDD y SSD también compatible con la con la estructura computacional HPC.
- Estos elementos tienen que ser compatibilidad con la estructura de computación HPC ya existente.

Además, se valorarán las siguientes características:

- Tiempo de procesamiento tanto en CPU como en GPU.
- Capacidad de almacenamiento tanto en HDD como en SSD.

Con la adquisición de este equipamiento, se prevé la cobertura de las necesidades computacionales de los proyectos previamente mencionados en relación al análisis masivo de datos generados.

I. COMPONENTES DEL EQUIPAMIENTO

Esta sección contiene los elementos necesarios para el equipamiento informático. Es de vital importancia que la infraestructura permita ser ampliada en el futuro y todas las posibles propuestas deberán tenerlo en cuenta en todos los accesorios propuestos. El sistema se debe entregar llave en mano, es decir, con el software instalado y configurado, incluyendo todos los accesorios necesarios para su conexión a BIODONOSTIA y al equipamiento informático (cables, conectores, conversores, PDU's, etc.). El software para las cargas de trabajo, la gestión y la administración del conjunto debe ser de código abierto. Adicionalmente, se debe ofrecer formación a nivel de administración del sistema entregado.

Asimismo, se debe garantizar el funcionamiento eficiente del sistema en un intervalo de temperaturas de operación entre 10 °C y 30 °C.

Se indican a continuación las especificaciones mínimas que deben tener los distintos componentes del equipamiento

2.1 Equipamiento compartido

El sistema debe ir montado en un rack con todos los componentes y accesorios del sistema de forma compacta, incluidos los necesarios para las comunicaciones internas y externas del sistema. Se precisa de un display que informe de las características térmicas internas y posibilite su gestión remota. El montaje en rack debe posibilitar futuras ampliaciones del sistema y estar preparado para soportar mezcla de diferentes nodos de computación con diferentes familias de procesadores.

Fuentes de alimentación:
Se deben proporcionar, de forma compacta en el chasis, fuentes de alimentación redundantes en todos los equipos y módulos de ventilación suficientes para cubrir las necesidades de suministro eléctrico con garantía de estabilidad y eficiencia energética y de refrigeración de la infraestructura. Todos deben disponer de slots PCI-E 4.0

Comunicación:
Se precisa de un bus de comunicación entre los nodos, de alta velocidad y rendimiento. Las comunicaciones internas entre nodos deben estar basadas en conexiones Infiniband de mínimo de 100 Gb/s.

Sistema operativo y software:
Se precisa de un sistema operativo abierto basado en Red Hat (tipo Centos o Rocky Linux) sobre el que se construya la solución de software que permita la gestión del uso del HPC, así como el acceso de los usuarios y las operaciones de las cargas de trabajo y de cómputo que se lancen sobre el sistema. El sistema debe ser de código abierto y se debe entregar llave en mano, es decir, con el software instalado y configurado. Se debe ofrecer una información a nivel de administración del sistema entregado, con documentación en español.

Se requiere un módulo de gestión y monitorización del clúster que permita:

a. Trabajar con imágenes de sistema operativo de forma que se puedan clonar nodos e instalar nodos remotamente de forma desatendida.
b. Gestión remota de los nodos (100% integrable GSM)
c. Monitorización mediante herramientas de código abierto como por ejemplo Nagios (o sus derivados).

Se precisa de un sistema de KVM sobre LAN, compatible HTML5 y Red Fist (IPMI 3.3).

Se requiere un sistema de carga, que garantice paralelizar entre todos los nodos, con una funcionalidad de sistema de colas o workflow, que permita la prioridad de trabajos entre los usuarios y posibilite definir varias colas en caso necesario.

Así mismo el sistema, buscando la mayor eficiencia energética, deberá permitir apagar y reencender de forma automática los nodos en caso de inactividad, definiendo con Biodonostia las políticas de apagado.

Además del sistema de gestión, el licitador deberá suministrar a Biodonostia una licencia del programa de computación científica que usa actualmente (Matlab) y realizar la instalación de ésta y de las herramientas de Big Data, quedando debidamente integrados en el sistema de colas y validados para los distintos usuarios del clúster.

El Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas del IIS Biodonostia viene utilizando desde hace tiempo Matlab para desarrollar software de computacón y por tanto es necesario que la licencia de software de computación sea también de Matlab para poder continuar utilizando el software desarrollado durante este tiempo con Matlab, pudiendo seguir aprovechando todas las posibilidades gráficas y de depuración que

ofrece Matlab. La adquisición de otro programa de desarrollo de software de computatión supondría la pérdida total del trabajo realizado en los últimos años.

2.2 Almacenamiento

Se exige una capacidad de almacenamiento, basada en discos SAS de 12 Gb/s y 7.200 rpm de al menos 600 TB brutos. El acceso a los datos, debe realizarse por una red de baja latencia, sin que esto suponga carga de trabajo para el procesador. Dicha conectividad, deberá ser de al menos 100 Gb/s, nativos en el protocolo Infiniband. Además, debe disponer de discos SSD para metadatos de 900 GB y de al menos 3 endurance diarios y proporcionar a lo que el fabricante recomiende de capacidad. Al margen de los discos instalados, el sistema debe permitir 36 discos SAS de 3,5" y 6 que permitan SATA/NVME y al menos debe ofrece 16 cores de CPU a 3 Ghz y 128 MB de caché L3, para la gestión del sistema.

El sistema debe tener 256 GB de memoria RAM DDR4 a 3200 Mhz ampliable a 4 TB.
También debe tener dos discos de 1 TB para el sistema operativo y de una o dos controladoras, que puedan gestionar todos los discos, por canales independientes.

El sistema de ficheros, tendrá que ser tipo GFS, garantizando el buen funcionamiento, y disponer de un contrato de mantenimiento de 3 años con el fabricante del software del sistema de almacenamiento de datos. Así mismo, el licitador, tendrá que tener una antigüedad mínima de 2 años en el montaje de dichas soluciones y estar certificado por el fabricante como Gold Partner, no pudiendo ser subcontratada esta condición, con al menos un Ingeniero certificado en dicha tecnología. Deberá ser un partner de EMEA y tendrá que ser comprobable a través de la web del fabricante.

El sistema debe posibilitar la definición de cuotas de uso, con seguridad de acceso de los usuarios, privilegios, etc.

2.3 Funcionalidades

Se debe garantizar la administración y mantenimiento de la infraestructura.
Además alojará el sistema de almacenamiento masivo de datos. Estas tareas implican:

- Servicios de directorio para la gestión de las cuentas de usuario.
- Sistema de gestión de procesos en cola, presentación del almacenamiento mediante sistemas de ficheros de Red (NFS, lustre o similar) a los nodos de computación, servidor Web y Servidor de base de datos.
- Gestión, mantenimiento y reporte de los posibles errores del cluster.
- Puerta de acceso entre la red de Biodonostia y la red interna de los equipos.

2.4 Nodos de computación CPU

Se exige un total de 5 nodos de computación con al menos:

Procesadores:
Se requiere un grupo de procesadores con un total de al menos 640 núcleos totales.
2 CPUs x86 con al menos un total de 64 cores físicos (128 hilos) en cada nodo (128 cores en total), con una frecuencia de al menos 2,45 Ghz (turbo a 3,5 Ghz) y consumo máximo por procesador de 280 W.

a. La CPU ofertada debe de ser de reciente llegada al mercado, no serán válidas CPUs anteriores a 2021.
b. Con 256 MB de cache L3 mínima.
c. Con un puerto dedicado para IPMI 3.3.
d. Con dos tarjetas de Red 1000 (Gigabit).

Memoria RAM:
Cada equipo debe de disponer al menos de 512 GB de memoria RAM y mínimo, se debe de ofertar 4 GB por core físico ofertado.

a. La memoria debe de ser DDR4 3200.
b. La memoria debe de estar balanceada, y cubrir todos los canales directos de memoria a cada CPU.

Almacenamiento para sistema operativo:
Discos duros SSD de al menos 1 TB de capacidad.

Conectividad:
Los equipos deben ofrecer conectividad 2 puertos de red 10GbaseT Ethernet y puerto Infiniband EDR, con su cableado correspondiente.

Alimentación:
Todos los equipos deben ofrecer fuente de alimentación redundante, extraíble en caliente y con al menos certificación Platinum de eficiencia energética. Los nodos, en caso de compartir chasis, deben ser extraíbles en caliente, para que la reparación de uno de ellos, no suponga la parada del resto de los nodos.

Así mismo, deben tener una boca dedicada para IPMI 2.0 o superior, que permita la conexión a la consola de administración y su gestión remota.

Fiabilidad:
Los equipos ofertados deben estar pensados para dar el mayor rendimiento 365 días al año, 24 horas al día, gracias a sus sistemas de refrigeración, bajo consumo y control de temperatura.

2.5 Nodo de computación GPU

Equipo de cómputo por GPU con arquitectura HGX: se requieren 1 nodo con las siguientes características mínimas:

DOS CPUs x86 con al menos 16 cores físicos en total con una frecuencia de al menos 3 GHZ (turbo mejorado hasta 3,7 Ghz), 128 MB de caché total y consumo por procesador de 155 W. El equipo debe soportar procesadores de un consumo de hasta 280 W.

Las CPUs ofertadas deben de ser de reciente llegada al mercado, no serán válidas CPUs anteriores a 2021.

Las CPUs deben de tener bus PCIe 4.0 y 64 bits.

El servidor debe de disponer al menos de 16 módulos de memoria de 32 GB (512GB en total) ampliable a 4 TB.

a. La memoria ofertada debe de ser DDR4 3200 Mhz.
b. La memoria debe de estar balanceada, y cubrir todos los canales directos de memoria a cada CPU.

En la oferta se debe de incluir un disco de al menos 7,68 TB NVMe para scratch PCIe 4.0. Este disco debe de ser calidad Enterprise y de reconocida marca. La lectura al menos debe de ser de 900.000 iOPS.

El equipo debe de llevar 2 puertos gigabit (RJ45).

El equipo debe de llevar una tarjeta Infiniband a 100 Gb/s con un puerto QSFP56 PCIe 4.0.

El servidor debe de disponer de al menos 6 puertos PCIe 4.0 x16 low profile, para ampliación de tarjetas de comunicaciones y otras. Debe incluir un puerto Mezzanine y 3 slots M.2 que soporten los formatos NGFF-2280/22110, todos ellos PCI-E 4.0.

Debe disponer de 4 bahias de extracción en caliente para discos NVME 2.5" Gen4 U.2 NVMe / SATA / SAS.

En la oferta se debe incluir 4 GPUs de gama "Enterprise" interconectadas entre ellas con arquitectura NVLINK de hasta 600GB/s GPU de interconexión simultánea entre las 4 tarjetas con las siguientes características:

a. 80 GB HBM2 con un ancho de banda de al menos 2 Gb/s, con al menos 9 TFLOPS en doble precisión y más de 5000 núcleos CUDA.
b. Tecnología Ampere
c. Mínimo de TFLOPS FP32: 19,5
d. Mínimo de TFLOPS FP64: 9,7
e. Mínimo de núcleos CUDA: 5120

Las fuentes de alimentación redundantes deben ser de al menos 3.000 W, para soportar ampliaciones futuras. Por cuestiones de espacio, el equipo no debe ocupar más de 2U ni se superior a 800 mm de profundidad, para que pueda ser albergado en el rack actual.
El equipo ofertado debe estar pensado para dar el mayor rendimiento 365 días al año, 24 horas al día, gracias a sus sistemas de refrigeración, bajo consumo y control de temperatura y debe ser totalmente integrable GSM.

2.5.1 SOFTWARE DE COMPUTACIÓN MATLAB COMPATIBLE CON GPU

Debe incluir una licencia permetua de Matlab, valida para un Centro de Investigación como es Biodonostia y soportar al menos 1 usuario.
Además de la licencia base de Matlab, debe incluir las siguientes librerías adicionales:
Bioinformatics Toolbox

- Computer Vision System Toolbox
- Control System Toolbox
- Curve Fitting Toolbox

- Database Toolbox
- Datafeed Toolbox
- Deep Learning Toolbox
- Embedded Coder
- Fuzzy Logic Toolbox
- Global Optimization Toolbox
- GPU Coder
- Image Acquisition Toolbox
- Image Processing Toolbox
- MATLAB Coder
- MATLAB Compiler
- MATLAB Compiler SDK
- MATLAB Report Generator
- Mapping Toolbox
- Model Predictive Control Toolbox
- Neural Network Toolbox
- Optimization Toolbox
- Parallel Computing Toolbox
- Partial Differential Equation Toolbox
- Reinforcement Learning Toolbox
- Robotics System Toolbox
- Robust Control Toolbox
- Signal Processing Toolbox
- SimBiology
- Spreadsheet Link
- Statistics and Machine Learning Toolbox
- Symbolic Math Toolbox
- System Identification Toolbox
- Text Analytics Toolbox
- Vision HDL Toolbox
- Wavelet Toolbox

3.5 Material adicional

El Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas del IIS Biodonostia dispone de los rack necesarios para su instalación. Sin embargo, el adjudicatario, tendrá que suministrar las PDUs necesarias para su conexión a la SAI de Biodonostia, con los conectores necesarios para ello. Dicha conexión será por cuenta del adjudicatario. Las PDUs deberán garantizar la conexión de las fuentes de alimentación redundantes por separado.

Los switchs no es necesario suministrarlos, toda vez que los tiene El Grupo de Biología Computacional y Biomedicina de Sistemas del IIS Biodonostia.

II. GARANTÍA DEL EQUIPAMIENTO Y SUS ACCESORIOS

3. CONDICIONES GENERALES DEL SUMINISTRO

3.1. Plazo de ejecución:

El plazo para la correcta instalación de los equipos será el indicado en el punto 9 de la Carátula.

3.2. Periodo de garantía:

El periodo de garantía y mantenimiento será como mínimo de tres años y su cómputo se iniciará a partir de la fecha de expedición del acta de recepción y aceptación del equipamiento. Si durante dicho plazo se pusieran de manifiesto vicios o defectos en los bienes suministrados, Biodonostia tendrá derecho a reclamar del adjudicatario la reposición de los bienes inadecuados o la reparación de los mismos si fuera suficiente.

Si Biodonostia estimase, durante el plazo de garantía, que los bienes suministrados no son aptos para el fin pretendido, como consecuencia de los vicios o defectos observados en ellos e imputables al adjudicatario y existiera fundado temor a que la reposición o reparación no baste para lograr aquel fin, podrá rechazar los bienes, dejándolos de cuenta del adjudicatario y quedando exenta de la obligación de pago, o teniendo derecho, en su caso, a la recuperación del precio satisfecho. Terminado el plazo de garantía sin que Biodonostia haya formulado reparos ni denuncia, el adjudicatario quedará exento de responsabilidad por razón de los bienes suministrados.

La garantía cubrirá cualquier tipo de fallo hardware bajo condiciones de operación continua a máxima carga en todos sus parámetros y en el entorno habitual de Biodonostia. La subsanación de fallos se efectuará en un máximo de 1 día laborable a partir de la recepción del reporte de avería. Los días laborables serán definidos por el calendario oficial definido por el País Vasco, generales y locales en Donostia-San Sebastián. El adjudicatario deberá ofrecer un servicio de 9x5 (es decir, 5 días laborables, durante 9 horas diarias como mínimo).

El coste de transporte de equipos o piezas de repuesto desde y hacia las dependencias de Biodonostia para efectuar reparaciones o reemplazos será incluido como parte de la garantía.

Cualquier reemplazo se realizará con un equipo que sea exactamente igual o superior al original en todas sus características. Excepcionalmente y bajo acuerdo explícito de Biodonostia, el reemplazo podrá ser compatible con el original pero de capacidad superior.

En caso de haber fallos en más del 10 % del equipamiento durante el primer mes de operación, el proveedor deberá sustituir el 100 % de los equipos afectados por otros con iguales prestaciones y cuyas especificaciones sean acordadas con Biodonostia. En caso de no hacer dicha sustitución, se considerará que el proveedor ha incurrido en el incumplimiento de una obligación contractual esencial.

En caso de haber tres o más fallos de hardware en un equipo durante cualquier periodo de seis meses dentro del periodo de garantía, no se aceptará ninguna reparación adicional de dicho dispositivo y el proveedor deberá proveer una unidad de reemplazo. En caso de haber un fallo de un mismo componente de hardware en más del 20 % de

los equipos, el proveedor deberá realizar la sustitución de dicho componente en el 100 % de los equipos de procesamiento.

La empresa adjudicataria deberá contar con personal técnico con formación específica en el mantenimiento y soporte del equipamiento ofertado. El soporte para la resolución de incidencias se podrá llevar a cabo telefónicamente y/o por correo electrónico, pudiendo ser atendido en remoto, con un tiempo máximo de respuesta de 24h.

Así mismo, el adjudicatario ofrecerá durante el periodo de garantía, un contrato de 50 horas para resolución de consultas software, en remoto o telefónicamente, por personal especializado en HPC.

Debe incluir al menos 20 horas de soporte especializado en cuestiones de HPC, incluido instalación de nuevas aplicaciones, librerías de cálculo, etc, por personal altamente cualificado para ello.

3.3. Gastos derivados del suministro:

Los portes derivados de este suministro estarán incluidos en el precio total ofertado por cada licitador. Además, el importe de adjudicación incluirá el servicio de instalación del equipamiento suministrado, incluyendo la puesta en marcha y comprobación del correcto funcionamiento del material instalado.

4. CONTENIDO DE LA PRESTACIÓN DEL SUMINISTRO

El suministro objeto de este contrato deberá incluir en el precio de adjudicación los siguientes aspectos:

- Instalación de los equipos y accesorios ofertados en el lugar designado (la entrega e instalación del equipo debe ir acompañada de la formación básica de los usuarios en el manejo del equipo).
- Suministro de los manuales técnicos de funcionamiento y de mantenimiento de los equipos a nivel de usuario, así como de los paquetes de software ofertados.
- El adjudicatario se compromete a remitir Biodonostia los requisitos de instalación del equipo con al menos 4 semanas de antelación a la instalación.

La fase de asesoramiento sobre el funcionamiento deberá ser detallada en la oferta y deberá incluir el asesoramiento y formación sobre el funcionamiento necesario para que el personal de Biodonostia pueda asumir todos los conocimientos necesarios para llevar a cabo como mínimo las siguientes tareas:

- Gestión diaria del sistema
- Monitorización
- Mantenimiento

Proyecto PID2020-119715GB-I00 financiado por:



- Resolución de incidencias y/o problemas

5. LUGAR DE EJECUCIÓN

El equipamiento será entregado e instalado en el Centro de Procesos de Datos (CPD) del Hospital Univeristario Donostia que se encuentra ubicado en San Sebastián (Gipuzkoa), en la siguiente dirección:

- Begiristain Doktorea Pasealekua, 20014 Donostia, Gipuzkoa.

This equipment is part of a project that has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No 899417.

Comisión Europea

Proyecto PID2020-119715GB-I00 financiado por MCIN/ AEI / 10.13039/501100011033.

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN
AGENCIA ESTATAL DE INVESTIGACIÓN

Proyecto 2022111054 concedido por el Departamento de Salud del Gobierno Vasco.

EUSKO JAURLARITZA GOBIERNO VASCO
OSASUN SAILA DEPARTAMENTO DE SALUD