

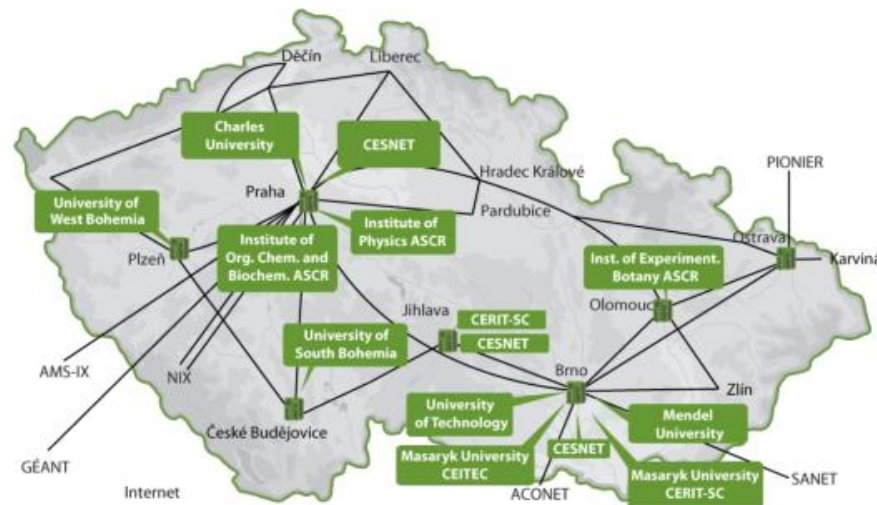
# Národní gridová infrastruktura MetaCentrum & související služby pro akademickou obec

**Tomáš Rebok**

MetaCentrum, CESNET z.s.p.o.  
CERIT-SC, Masarykova univerzita  
(rebok@ics.muni.cz)

## MetaCentrum @ CESNET

- aktivita sdružení CESNET
- od roku 1996 **koordinátor Národní Gridové Infrastruktury**
  - integruje velká/střední HW centra (clustery, výkonné servery a úložiště) několika univerzit/organizací v rámci ČR
    - prostředí pro (spolu)práci v oblasti výpočtů a práce s daty
  - součást e-infrastruktury CESNET
  - integrováno do **evropské gridové infrastruktury (EGI)**



# Výpočetní cluster

- skupina vzájemně propojených „běžných“ počítačů



(dříve 😊)

# Výpočetní cluster

- skupina vzájemně propojených „běžných“ počítačů



(dnes)

## MetaCentrum NGI

- **přístupné zaměstnancům a studentům VŠ/univerzit, AV ČR, výzkumným ústavům, atp.**

- komerční subjekty pouze pro veřejný výzkum

- **nabízí:**

<http://metavo.metacentrum.cz>

- **výpočetní zdroje**

- **úložné kapacity**

- **aplikační programy**

- **po registraci k dispozici zcela zdarma**

- „placení“ formou **publikací s poděkováním**

- prioritizace uživatelů při plném vytížení zdrojů



# NGI – dostupný výpočetní hardware

- výpočetní zdroje: **cca 13500 jader (x86\_64)**
  - uzly s nižším počtem výkonných jader:
    - 2x4-8 jader
  - uzly se středním počtem jader (SMP stroje):
    - 32-80 jader
  - paměť až 1 TB na uzel
  - uzly s vysokým počtem jader: SGI UV 2000
    - 288 jader (x86\_64), 6 TB operační paměti
    - 384 jader (x86\_64), 6 TB operační paměti
  - další „exotický“ hardware:
    - uzly s GPU kartami, Xeon Phi, SSD disky, ...



# NGI – dostupný úložný hardware

- **cca 3 PB pro pracovní data**
  - úložiště v Brně, Plzni, ČB, Praze
  - uživatelská kvóta **1-3 TB na každém z úložišť**
- **cca 22 PB pro dlouhodobá/archivní data**
  - (HSM – MAID, páskové knihovny)
  - „neomezená“ uživatelská kvóta

# NGI – dostupný software

- **~ 300 různých aplikací (instalováno na požádání)**
  - viz <http://meta.cesnet.cz/wiki/Kategorie:Aplikace>
- **průběžně udržované vývojové prostředí**
  - GNU, Intel, PGI, ladící a optimalizační nástroje (TotalView, Allinea),...
- **generický matematický software**
  - Matlab, Maple, Mathematica, gridMathematica,...
- **komerční i volný software pro aplikační chemii**
  - Gaussian 09, Gaussian-Linda, Gamess, Gromacs, Amber,...
- **materiálové simulace**
  - ANSYS Fluent CFD, Ansys Mechanical, Ansys HPC...
- **strukturní biologie, bioinformatika**
  - CLC Genomics Workbench, Geneious, Turbomole, Molpro, ...
  - řada volně dostupných balíčků
- ...



# NGI – výpočetní prostředí

- *dávkové úlohy*

- popisný skript úlohy
- oznámení startu a ukončení úlohy

- *interaktivní úlohy*

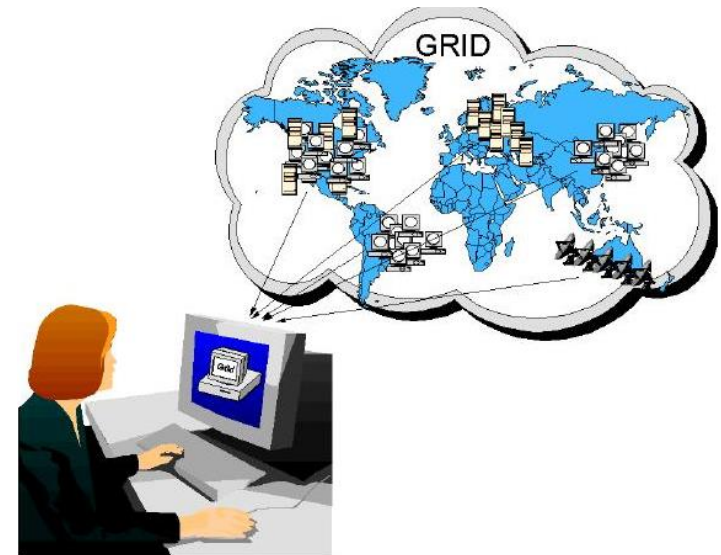
- textový i grafický režim

- *cloudové rozhraní*

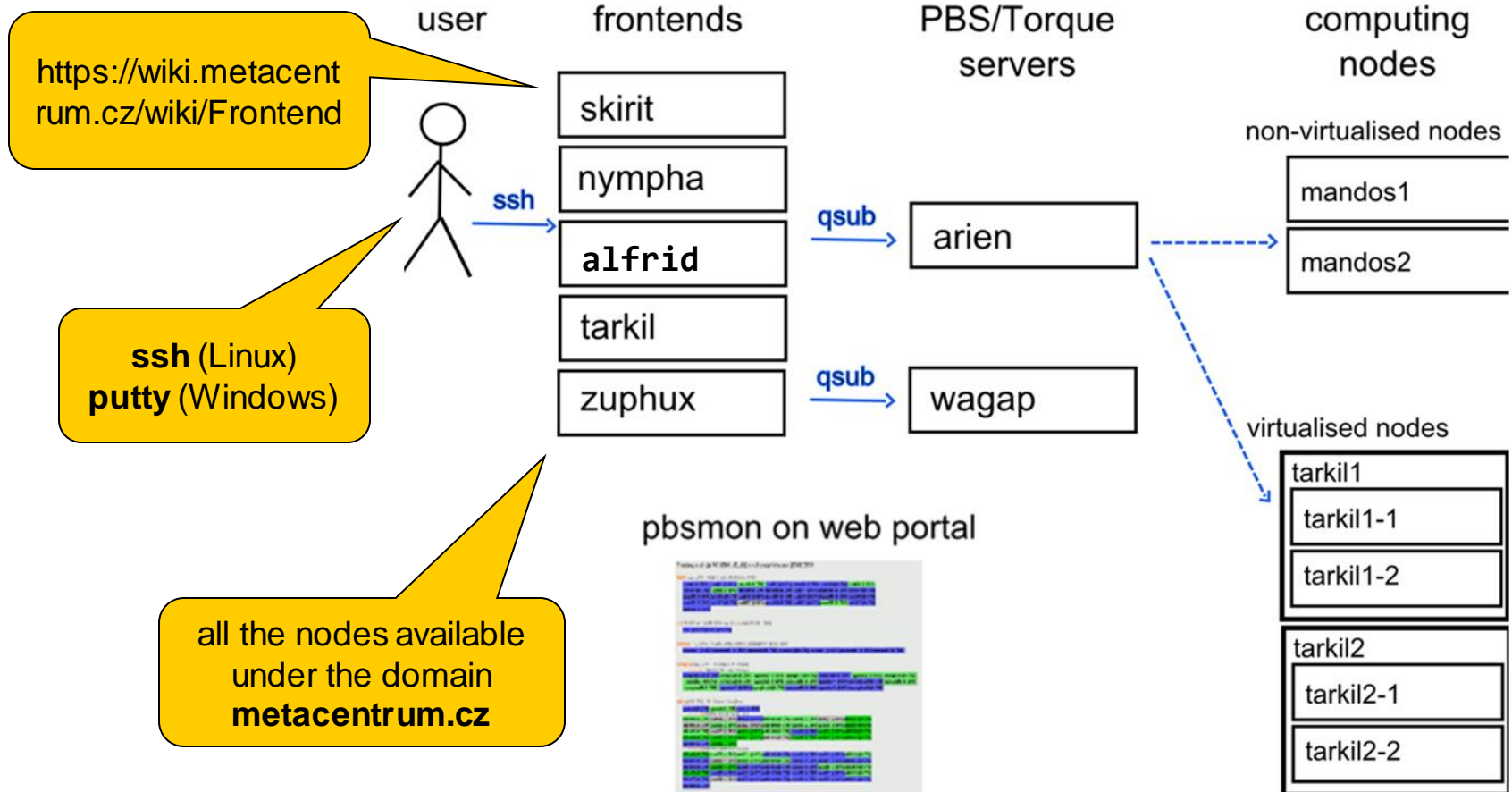
- základní kompatibilita s Amazon EC2
- uživatelé nespouští úlohy, ale virtuální stroje

opět zaměřeno na vědecké výpočty

možnost vyladit si obraz a přenést ho do MetaCentra/CERIT-SC (Windows, Linux)



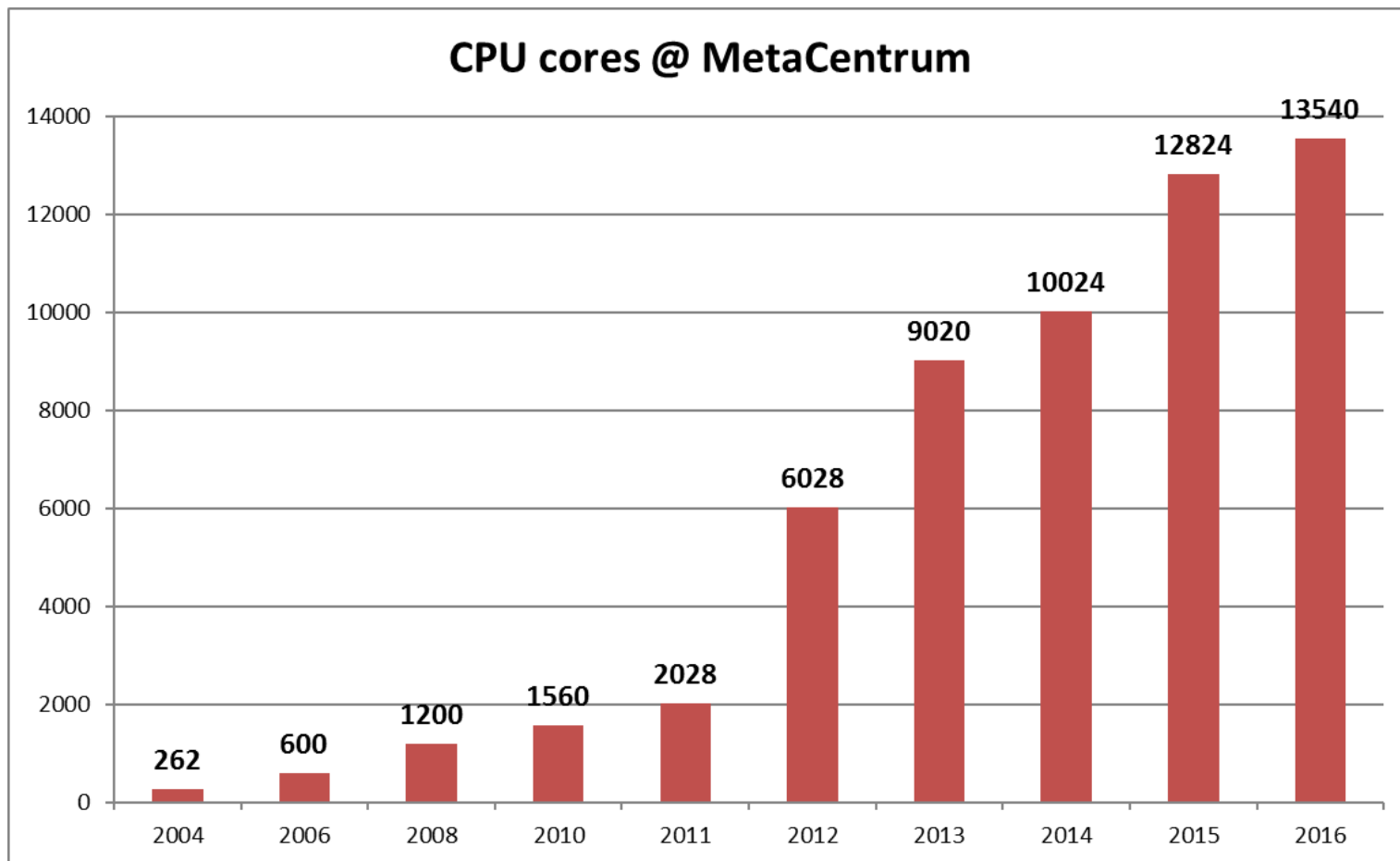
# NGI pod pokličkou



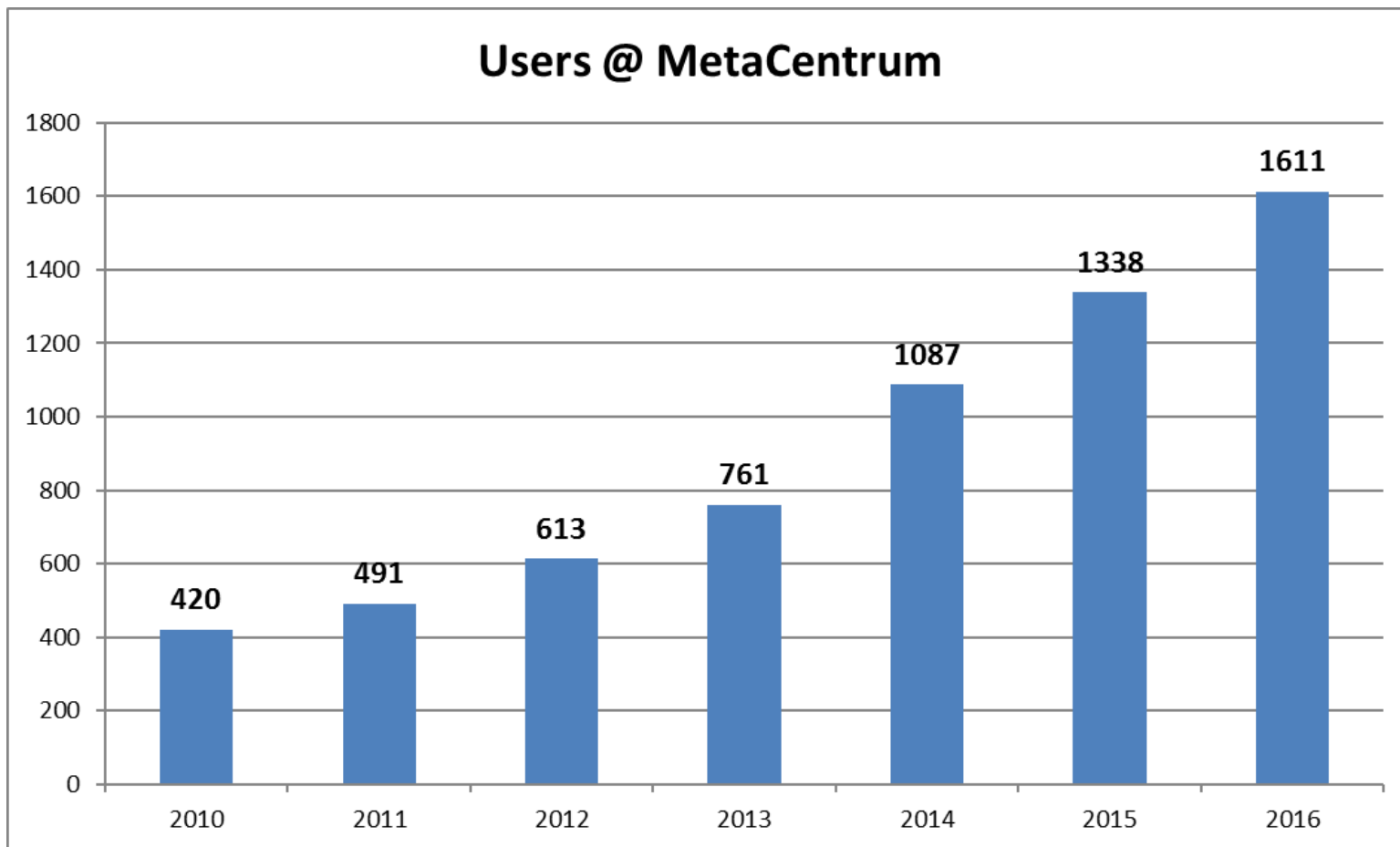
## NGI v číslech...

- *cca 13540 jader, cca 600 uzlů*
- *za rok 2016:*
  - *1611 uživatelů (k 31.12.2016)*
  - *cca 3,6 mil. spuštěných úloh*
    - *cca 9800 úloh denně*
    - *cca 2200 úloh / uživatel*
  - *celkem propočítáno cca 9,5 tis. CPUlet*

## ... a grafech



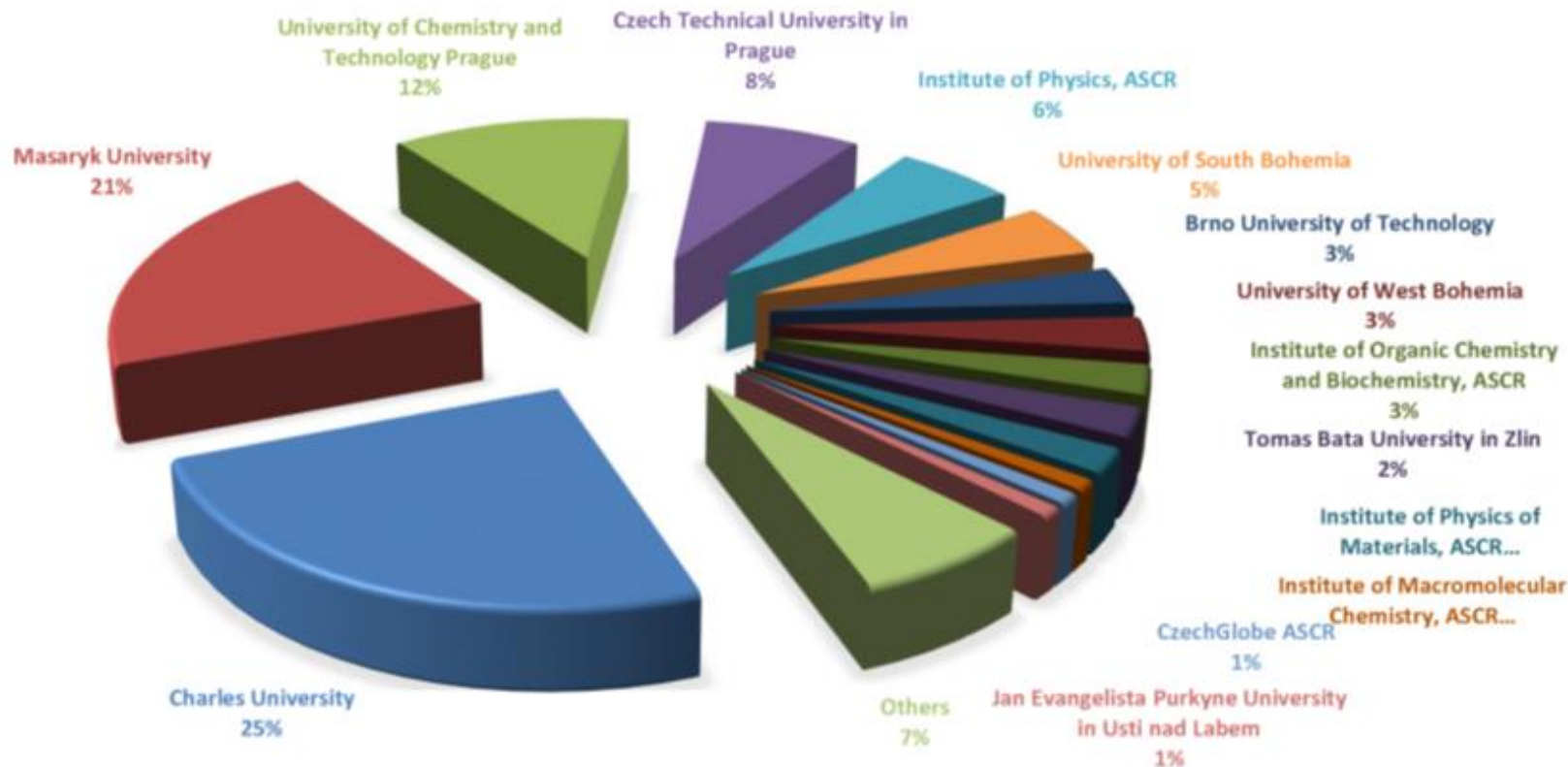
## ... a grafech



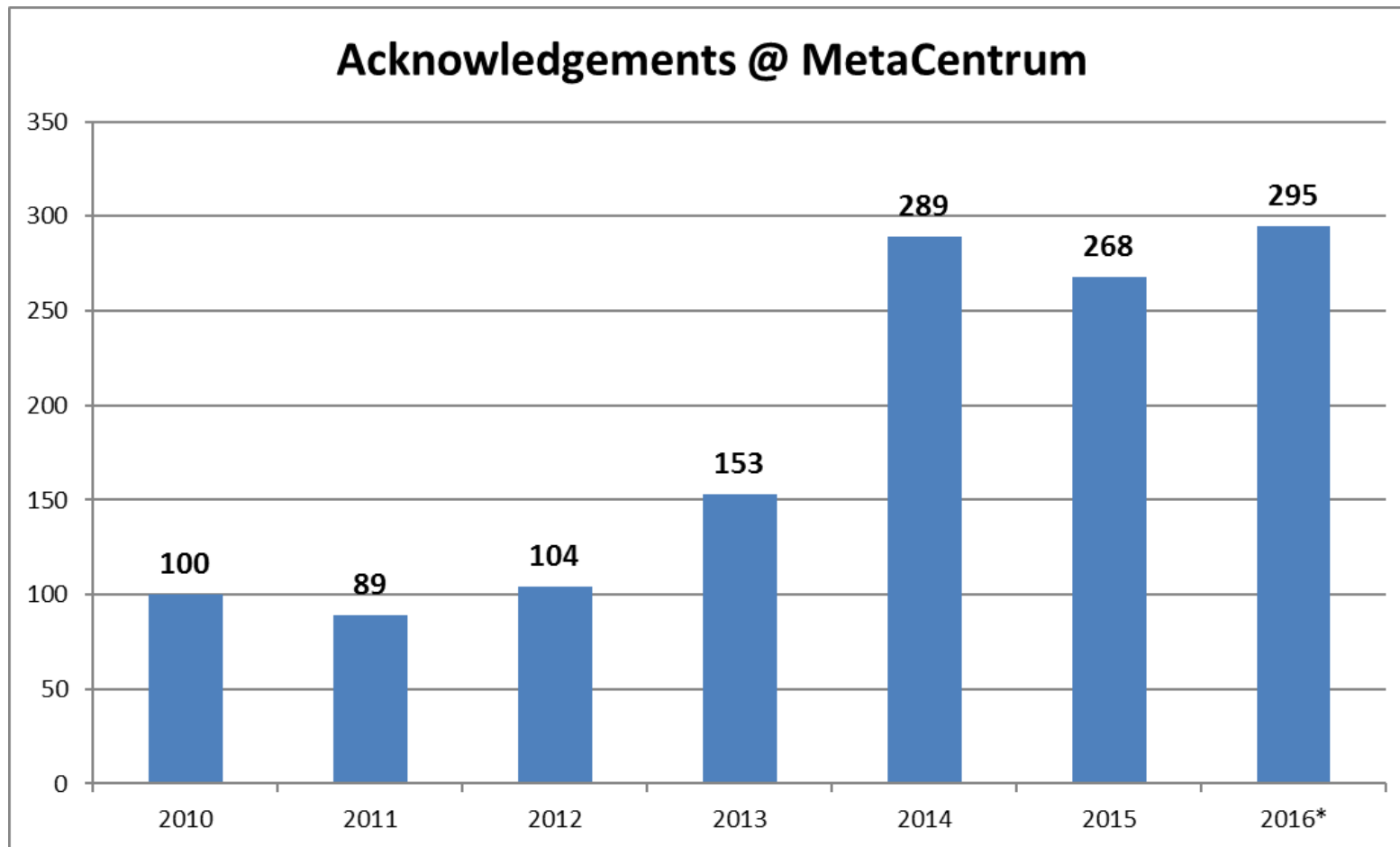
## ... a grafech

### Organization according to real computed CPU time

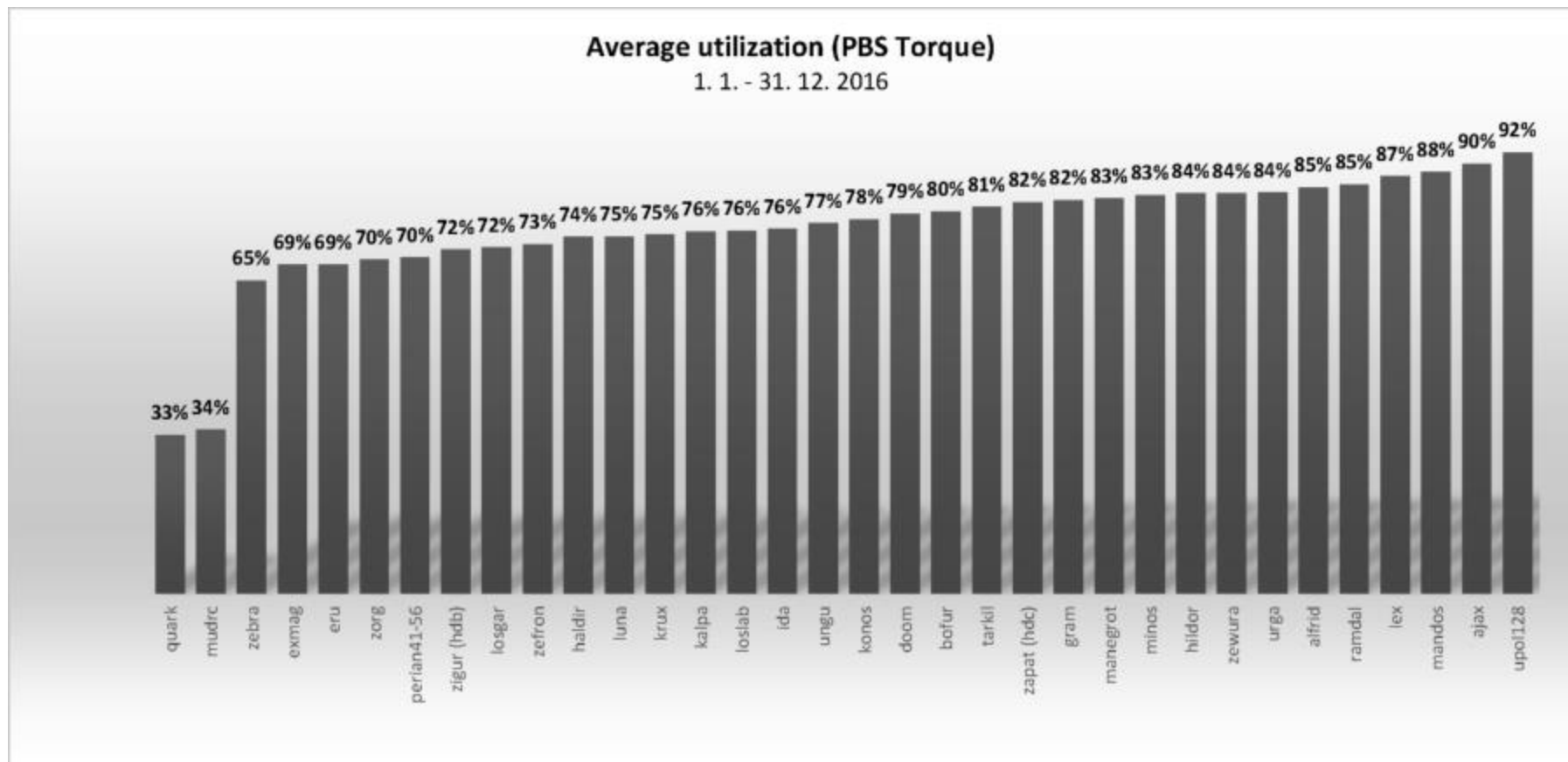
PBS Torque, 1.1. - 31.12.2016



## ... a grafech



## ... a grafech





## MetaCentrum NGI – výpočetní služby

---

# Grid computing

## Suitable for:

- long-term and/or large-scale computations
  - (primarily batch processing)
- applications not requiring special OSs (features)
  - pre-installed or users' ones

## How to compute?

- *batch jobs*
    - the work described by job scripts
  - *interactive jobs*
    - text interface
    - graphical user interface (VNC)
-

# Cloud computing

## Suitable for:

- applications requiring special environment (OS) and/or features
  - one can run various operating systems (incl. Windows OS) and/or application equipment
  - administrator/root access is provided

## How to compute?

- OpenNebula GUI for deployed nodes management
    - nodes simply created based on predefined templates
  - interact via:
    - cloud/VM console
    - internal OS services (SSH, VNC, Rdesktop, ...)
-

# Cloud computing

OpenNebula  
MetaCentrum CERIT

Dashboard

Virtual Resources

Virtual Machines

Templates











Images

Files & Kernels

OneFlow

## Virtual Machines

jeronimo OpenNebula

ID	Owner	Group	Name	Status	Host	IPs	VNC
21254	xvelan	kypo	PB173-2015	RUNNING	hda46.priv.cerit-sc.cz	147.251.253.168 10.18.1.142	
21241	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-player	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.66	
21240	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-eurovis-DB-server	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.110	
21239	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-general-user	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.192	
21238	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-eurovis-web-server	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.104	
21237	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-general-mobile-device	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.48	
21236	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-general-web-server	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.84	
21235	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO-network	RUNNING	hda12.priv.cerit-sc.cz	10.18.2.184 10.19.2.22 10.19.3.83 10.19.3.47 10.19.3.103 10.19.3.191 10.19.3.109 10.19.3.65	
21234	kypo-on	kypo	EUROVIS-SCENARIO	RUNNING	hda46.priv.cerit-sc.cz	147.251.252.232 10.18.2.183 10.19.2.21	
21190	kypo-on	kypo	ivo-analysis-test2	RUNNING	hda41.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.96	
21189	kypo-on	kypo	ivo-analysis-test1	RUNNING	hda41.priv.cerit-sc.cz	10.19.3.60	

# Hadoop computing

## Hadoop:

- an open-source framework for distributed storage and **distributed processing of large volumes of data**
  - large data blocks splitted and distributed amongst nodes
  - a MapReduce-based algorithm (= data processing code) is distributed over the distributed blocks and processed in parallel

## Suitable for:

- huge datasets to be processed
    - but NOT suitable for arbitrary data processing one can imagine
    - just for the processing meeting the MapReduce programming model
      - e.g., counting the number of times words occur in a corpus
-

# Specialized frontends/environments

## Suitable for:

- user communities with well-defined processing needs
  - workload & computing pipeline orchestrators available via GUI
  - usually adapted to user needs and/or because of interoperability with our infrastructure
    - in background, the proper computing method is used (grid, cloud, etc.)

## How to compute?

- Galaxy, Chipster, etc.
  - Docker instances in close future
-

## e-infrastruktura CESNET: doplňkové služby

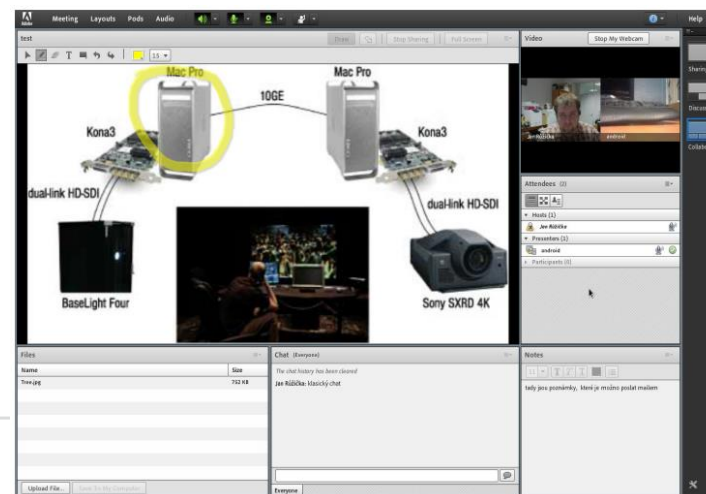
# e-infrastruktura CESNET – další služby I.

## • Úložné služby:

- infrastruktura (Plzeň, Jihlava, Brno) o kapacitě **22 PB**
  - určeno pro zálohy, archivace, sdílení velkých dat, ...
- hierarchická úložiště (HSM – pásky, MAID), „cena/kapacita“
- **FileSender**: <http://filesender.cesnet.cz>
  - zasílání souborů až 500 GB
- **OwnCloud**: <http://owncloud.cesnet.cz>
  - prostor 100 GB / uživatel

## • Podpora vzdálené spolupráce

- videokonference (H.323, SIP)
- webkonference (Adobe Connect)
- streaming, IP telefonie





## e-infrastruktura CESNET – další služby II.

- **Páteřní síť: CESNET2**
  - jádro sítě **100Gbps**, přímé propojení do evropské sítě GÉANT
- **Sledování provozu sítě**
  - detekce anomálií, monitoring kvalitativních charakteristik sítě
- **Bezpečnost**
  - řešení bezpečnostních incidentů, CESNET CERTS
- **Federace identit: EduID.CZ**
  - jedno heslo pro přístup k více službám
- **Certifikační autorita**
  - uživatelské a serverové certifikáty (TERENA)
- **Bezdrátová síť: Eduroam.cz**
  - koordinace na národní úrovni
- ... (viz <http://www.cesnet.cz/sluzby> )

# Služby pro podporu vědy a výzkumu

# Centrum CERIT-SC

- **výzkumné centrum vybudované na ÚVT MU**
  - transformace Superpočítačového centra Brno (SCB) při Masarykově univerzitě do nové podoby
- **významný člen/partner národního gridové infrastruktury**
  - I. **poskytovatel HW a SW zdrojů**
    - SMP uzly (2592 jader)
    - HD uzly (2624 jader)
    - 2x SGI UV uzel (384+288 jader, 6 TB paměti)
    - Xeon Phi cluster
    - úložné kapacity (~ 3,5 PB)
    - SW výbava totožná s MetaVO
  - II. **služby nad rámec „běžného“ HW centra –**  
**zázemí pro kolaborativní výzkum**



# CERIT-SC – cíle Centra

## Hlavní cíle Centra:

### I. Podpora experimentů s novými formami, architekturou a konfiguracemi e-Infrastruktury

- **vysoce flexibilní infrastruktura** (experimentům příznivé prostředí)
- **vlastní výzkum**, zaměřený na principy a technologie e-Infrastruktury a její optimalizaci

### II. Studium a posun možností špičkové e-Infrastruktury úzkou výzkumnou spoluprací mezi informatiky a uživateli takovéto infrastruktury

- výpočetní a úložné kapacity jsou **pouze nástrojem**
- zaměření na **inteligentní** a **nové** použití těchto nástrojů
  - synergický posun **informatiky a spolupracujících věd (kolaborativní výzkum)**
  - **pro informatiku generování nových otázek**
  - **pro vědy generování nových příležitostí**

# CERIT-SC – zázemí

## *Snaha o maximální zapojení studentů:*

- bakalářského -> **magisterského** -> **doktorského** studia
- nejen úzce zaměřená a dedikovaná pracovní síla, ale především
  - **výchova nových odborníků** v oblasti e-infrastruktur
  - **výchova erudovaných uživatelů** e-infrastruktury

## *Silné odborné zázemí:*

- **dostupnost odborníků/konzultantů** jak teoretického, tak praktického zaměření
  - dlouholetá tradice **spolupráce s Fakultou informatiky MU**
  - dlouholetá tradice **spolupráce se sdružením CESNET**
- **dlouhodobé zkušenosti** s provozováním e-infrastruktury
  - SCB (nyní CERIT-SC) je zakladatel MetaCentra

# *Kolaborativní výzkum*

# Rekonstrukce stromů I.

## Rekonstrukce individuálních stromů z laserových skenů

- **partner:** *Centrum výzkumu globální změny AV ČR (CzechGlobe)*
- **cíl projektu:** návrh algoritmu pro rekonstrukci 3D modelů stromů
  - z mraku nasnímaných 3D bodů
    - strom nasnímán laserovým snímačem LiDAR
    - výstupem jsou souřadnice XYZ + intenzita odrazu
  - *očekávaný výstup:* 3D struktura popisující strom
    - identifikovat **základní strukturální prvky** (kmen a hlavní větve)
  - *primární zaměření:* smrky
- **hlavní problémy:** překryvy (mezery v datech)



# Rekonstrukce stromů II.

## Rekonstrukce individuálních stromů laserového skenu – cont'd

- v rámci DP navržena *inovativní metoda* rekonstrukce 3D modelů smrkových stromů
- rekonstruované modely využity v návazném výzkumu
  - získávání statistických informací o množství dřevité biomasy a o základní struktuře stromů
  - parametrizované opatřování zelenou biomasou (mladé větve + jehličky) – součást PhD práce
  - importování modelů do nástrojů umožňujících analýzu šíření slunečního záření s využitím DART modelů

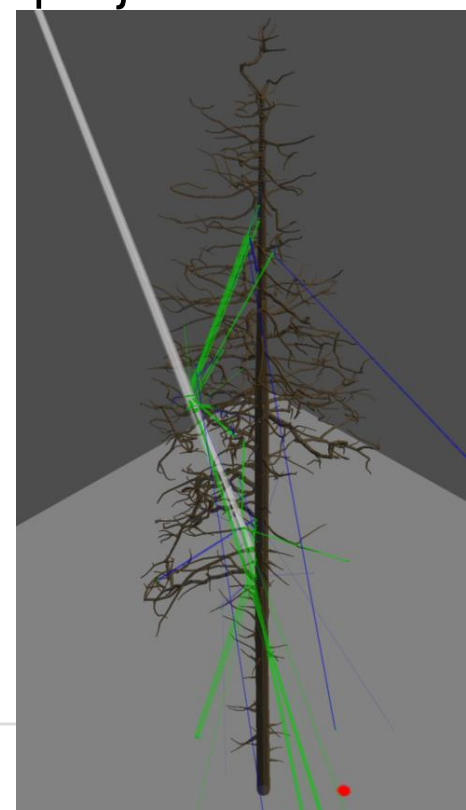
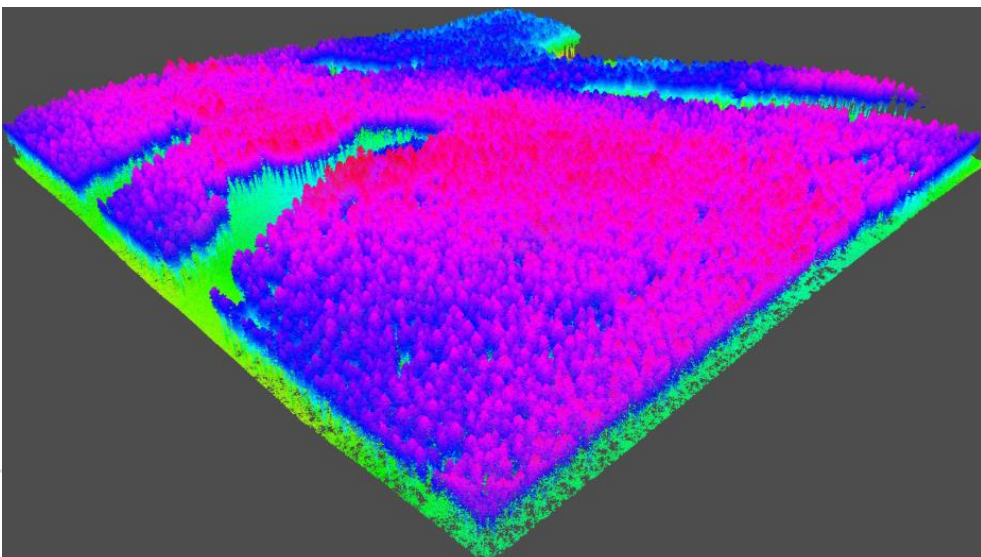




# ■ Rekonstrukce lesů I.

## Rekonstrukce lesních porostů z full-wave LiDAR skenů

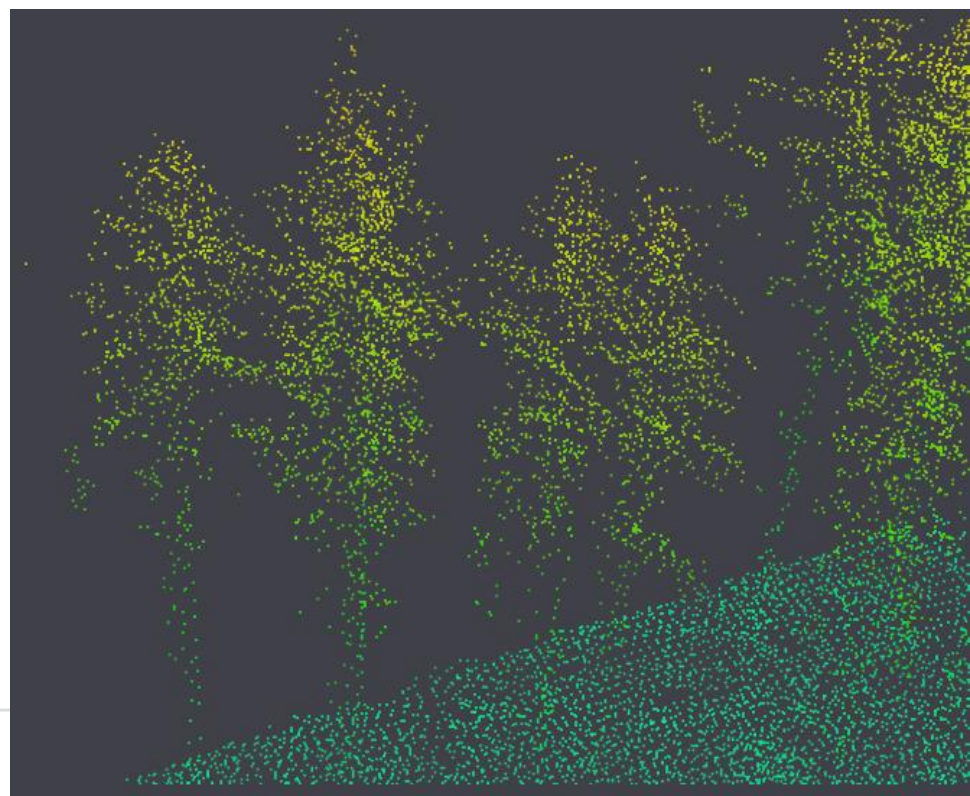
- „s jídlem roste chuť“ 😊
- návazná PhD práce, příprava budoucího společného projektu
- **cíl: co nejděrnější 3D rekonstrukce celých lesních porostů z leteckých full-wave LiDARových skenů**
  - možné využití hyperspektrálních skenů, termálních skenů, in-situ měření, ...



# ■ Rekonstrukce lesů II.

## Rekonstrukce lesních porostů z full-wave LiDAR skenů

- skeny získávány leteckým snímáním
- **diametrálně odlišný problém** – extrémní množství bodů, které jsou však *mnohem řidší*
  - nastíněné algoritmy pro přesné rekonstrukce jednotlivých stromů **nelze aplikovat**
  - nutno revidovat i metody pro **vizualizaci a uložení dat/modelů**



# Identifikace problémových uzavírek I.

## Hledání problematických uzavírek v silniční síti ČR

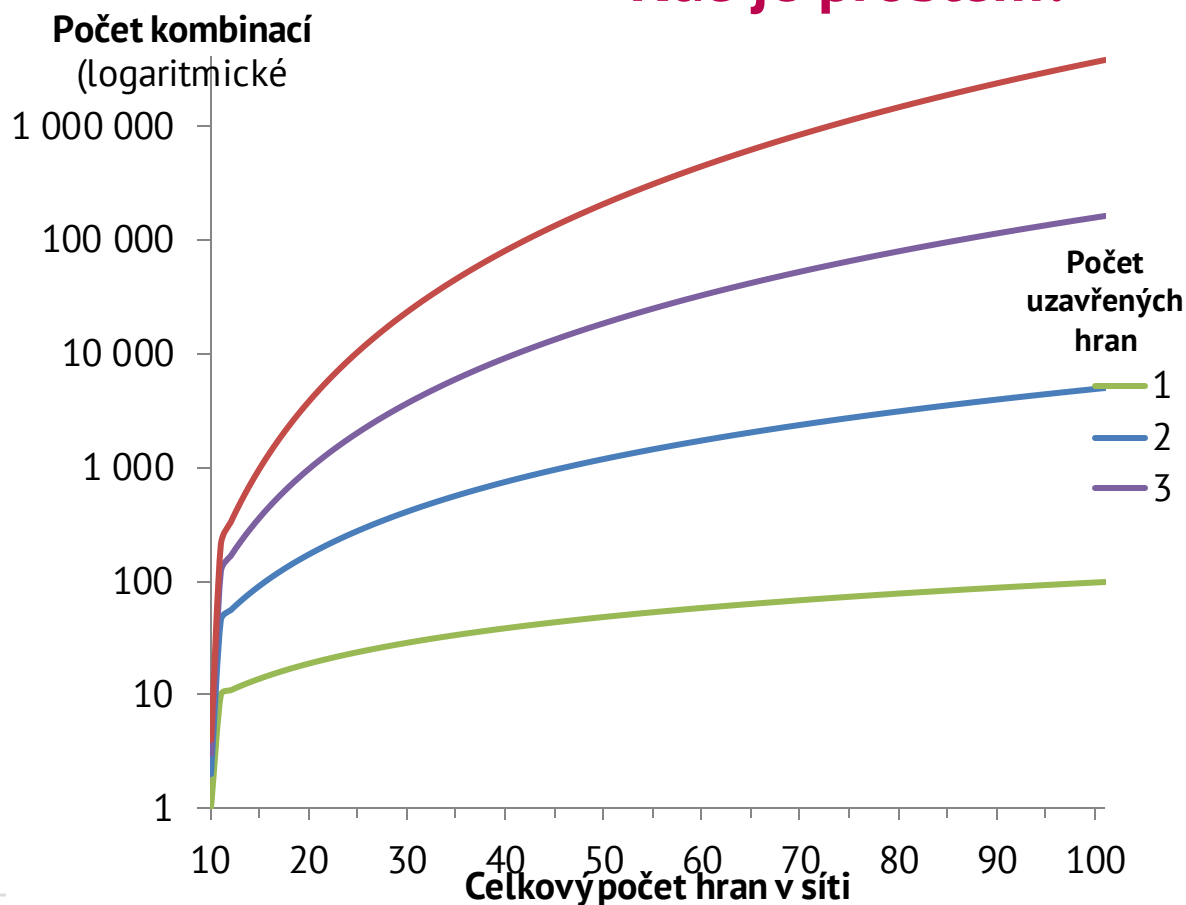
- **partner:** *Centrum Dopravního Výzkumu v.v.i., Olomouc*

**cíl projektu: nalezení metody pro identifikaci problémových uzavírek v silniční síti ČR (aktuálně Zlínského kraje)**

- identifikace uzavírek vedoucích (dle definovaných ohodnocovacích funkcí) k problémům v dopravě
  - převedený problém: **nalezení všech rozpadů grafu**
  - zjednodušený problém: **nalezení všech rozpadů grafu generovaných N hranami**
- 
- **hlavní problémy: výpočetní náročnost (NP-těžký problém)**
    - přístup „hrubou silou“ selhával již při uzavření 3 hran

# Identifikace problémových uzavírek II.

## Kde je problém?



### Sít' Zlínského kraje

724 uzlů

974 hran

1. 974

2. 473 851

3. 153 527 724

4. 37 268 855 001

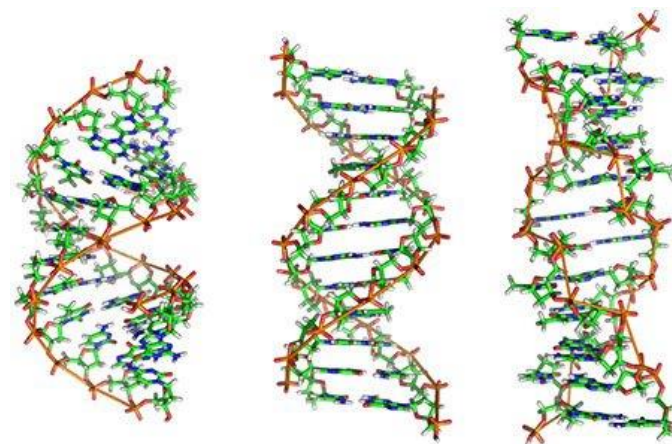
5. 7 230 157 870 194

...

# Korekce chyb a skládání genomu

## Sekvenování *Trifolium pratense* (Jetel luční)

- partner: *Ústav experimentální biologie PŘF MU*
- cíl: optimalizace dostupných nástrojů pro skládání a opravy chyb v DNA kódech
  - *analýzy DNA (nejen) jetele vedou k výpočetně náročným problémům*
    - 50 GB vstup => **cca 500 GB potřebné paměti** (aplikace Echo)
    - existují **větší vstupy**
- v rámci DP **paralelizováno a optimalizováno** až na **cca 50% využití paměti**



# Výpočetní chemie a biochemie I.

## Výpočet konformace molekul z řídkých NMR dat

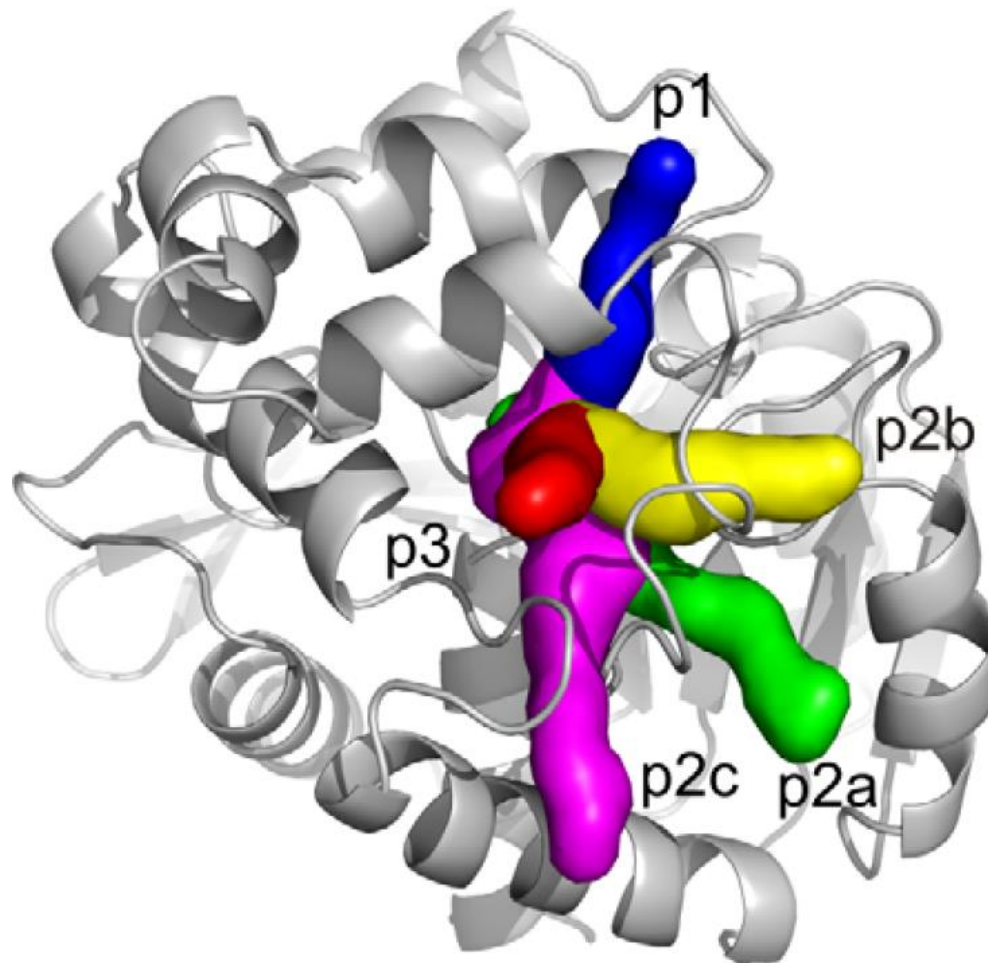
- **partner:** *Středoevropský technologický institut (CEITEC)*
- **cíl projektu:** kombinované výpočetní zpracování výstupů několika **nezávislých experimentálních metod** (vedoucí ke zjištění tvaru molekuly určitého vzorku)
  - kombinace výstupů **molekulové dynamiky, NMR a SAXS** metod
  - existuje vyzrálý (i komerční) SW, avšak **složitý na použití**
    - náchylnost k chybám (při formulaci zadání)
    - složitost při kombinaci dat z různých zdrojů
  - **vlastní vývoj kombinovaných výpočetních metod** (rozšíření existujících nástrojů)
    - obohacení SW pro zpracování NMR o simulaci molekulové dynamiky
    - snaha vystačit s výsledky časově i finančně méně náročných variant exper.
    - aktuální výsledky ukazují na **mnohem realističtější geometrie rekonstruovaných molekul**

# Výpočetní chemie a biochemie III.

## Analýza transportních cest v proteinech

- **partner:** *Loschmidt Laboratories MU*
- **cíl projektu:** analýza možností transportu molekul ligandu (např. léčivo) na aktivní místa proteinů
  - tj. zajištění nejen kýženého účinku molekuly na protein, ale zejména ověření možností transportu této molekuly k aktivním místům proteinů
  - v současné době jsou metody analýzy transportu buď **nepřesné** nebo **velmi výpočetně náročné** (molekulová dynamika)
  - snaha o nalezení metody pro **analýzu energie nutné na průchod ligandu do proteinu** (vyhodnocení průchodnosti „tunelu“) **méně náročným způsobem**
    - zejména se zajištěním věrohodných/přesných výsledků

# Výpočetní chemie a biochemie IV.



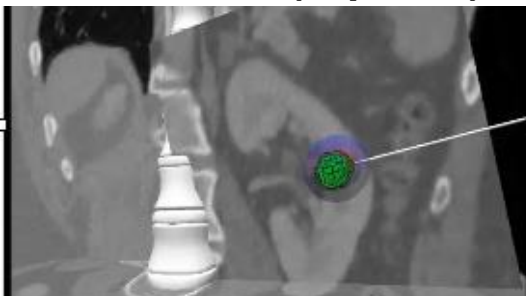


# Modelování měkkých tkání v reálném čase

- Využití biomechanických modelů vytvořených z pre-operativních dat pacientů (CT, MRI) pro aplikace v medicíně
  - reálný čas [25Hz] nebo dokonce hmatová (haptická) interakce [ $>500\text{Hz}$ ]



Simulátor operace kataraktu  
MSICS



Kryoablace: plánování  
umístění elektrody



Laparoskopie: vizualizace  
vnitřních struktur

Chirurgické trenažéry

Pre-operativní plánování

Navigace během operace

2010

2014

2018

Simulace vyžadují kombinaci různých reprezentací objektů:

- **geometrie**: detekce kolizí, vizualizace, metriky pro verifikaci a validaci
- **fyzika**: realistické chování objektů, deformace, interakce mezi objekty

## Další spolupráce ...

- **Virtuální mikroskop, patologické atlasy**
  - *partner: LF MU*
- **Biobanka klinických vzorků (BBMRI\_CZ)**
  - *partner: Masarykův onkologický ústav, Recamo*
- **Modely šíření epileptického záchvatu a dalších dějů v mozku**
  - *partner: LF MU, ÚPT AV, CEITEC*
- **Bioinformatická analýza dat z hmotnostního spektrometru**
  - *partner: Ústav experimentální biologie PŘF MU*
- **Optimalizace Ansys výpočtu proudění čtyřstupňovou, dvouhřídelovou plynovou turbínou s chlazením lopatek**
  - *partner: SVS FEM*
- **3.5 miliónu „smartmeterů“ v cloudu**
  - *partner: Skupina ČEZ, MycroftMind*
- **Platforma pro poskytování specializovaných meteopredikcí pro oblast energetiky**
  - *partner: CzechGlobe, NESS, MycroftMind*
- ...

## Závěr

- **Národní gridová infrastruktura MetaCentrum:**

- součást **Velké infrastruktury CESNET** (→ doplňkové služby)
- **integrace HW center** do uniformní infrastruktury
- výpočetní **služby pro českou akademickou obec a veřejný výzkum**
  - + úložné služby, aplikační programy, ...
- **open-source technologie** (vč. jejich dalšího vývoje) + **vlastní nástroje**

- **Centrum CERIT-SC:**

- **výpočetní služby** (produkční i flexibilní infrastruktura, integrace do NGI)
  - **služby pro podporu kolaborativního výzkumu** (spolupráce s partnery)
-

