

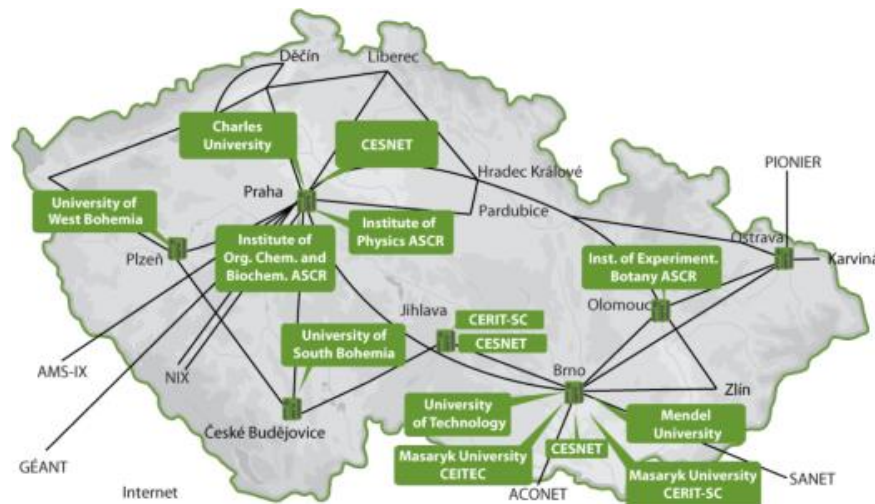
Národní gridová infrastruktura MetaCentrum & související služby pro akademickou obec

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 17900 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 6 PB pro pracovní data**
 - úložiště v Brně, Plzni, ČB, Liberci, Praze
 - uživatelská kvóta **1-3 TB na každém z úložišť**
- **cca 22 PB pro dlouhodobá/archivní data**
 - (HSM – MAID, páskové knihovny)

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**

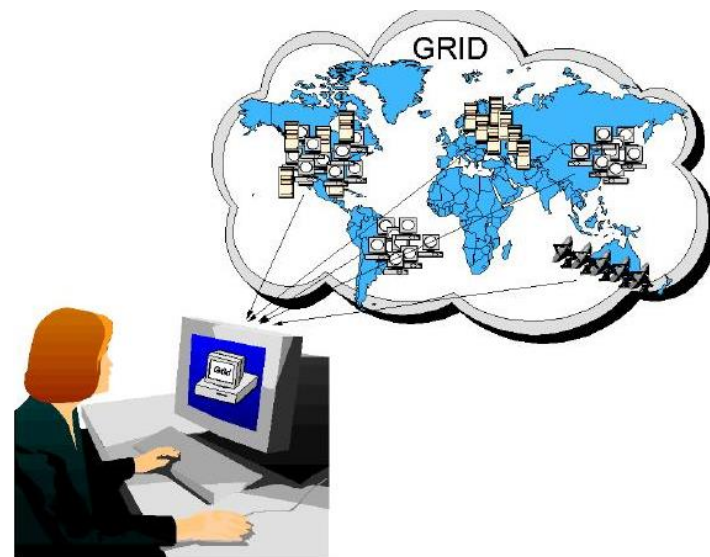
- textový i grafický režim

- **cloudové rozhraní**

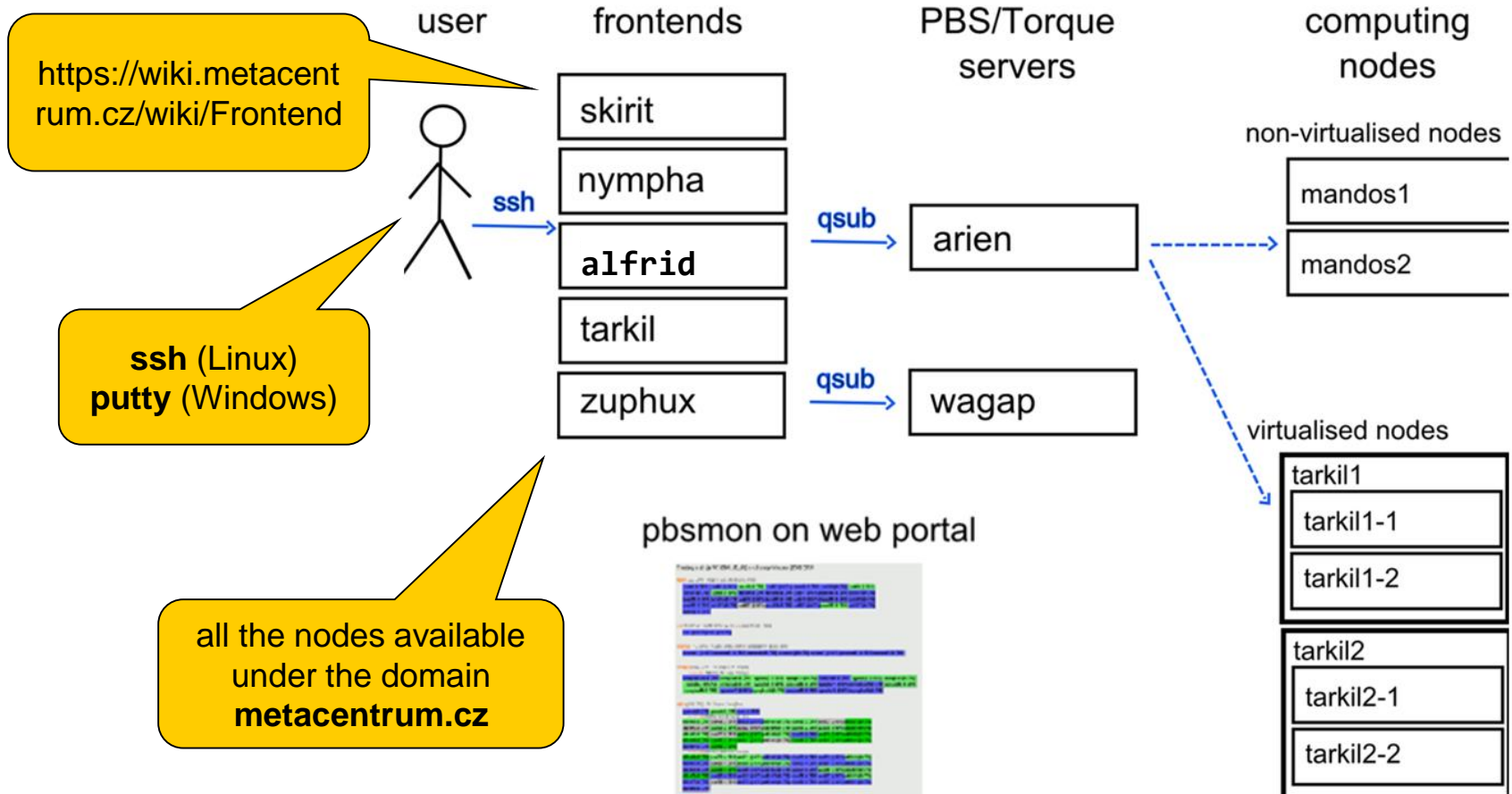
- základní kompatibilita s Amazon EC2
- uživatelé nespouští úlohy, ale virtuální stroje

opět zaměřeno na vědecké výpočty

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



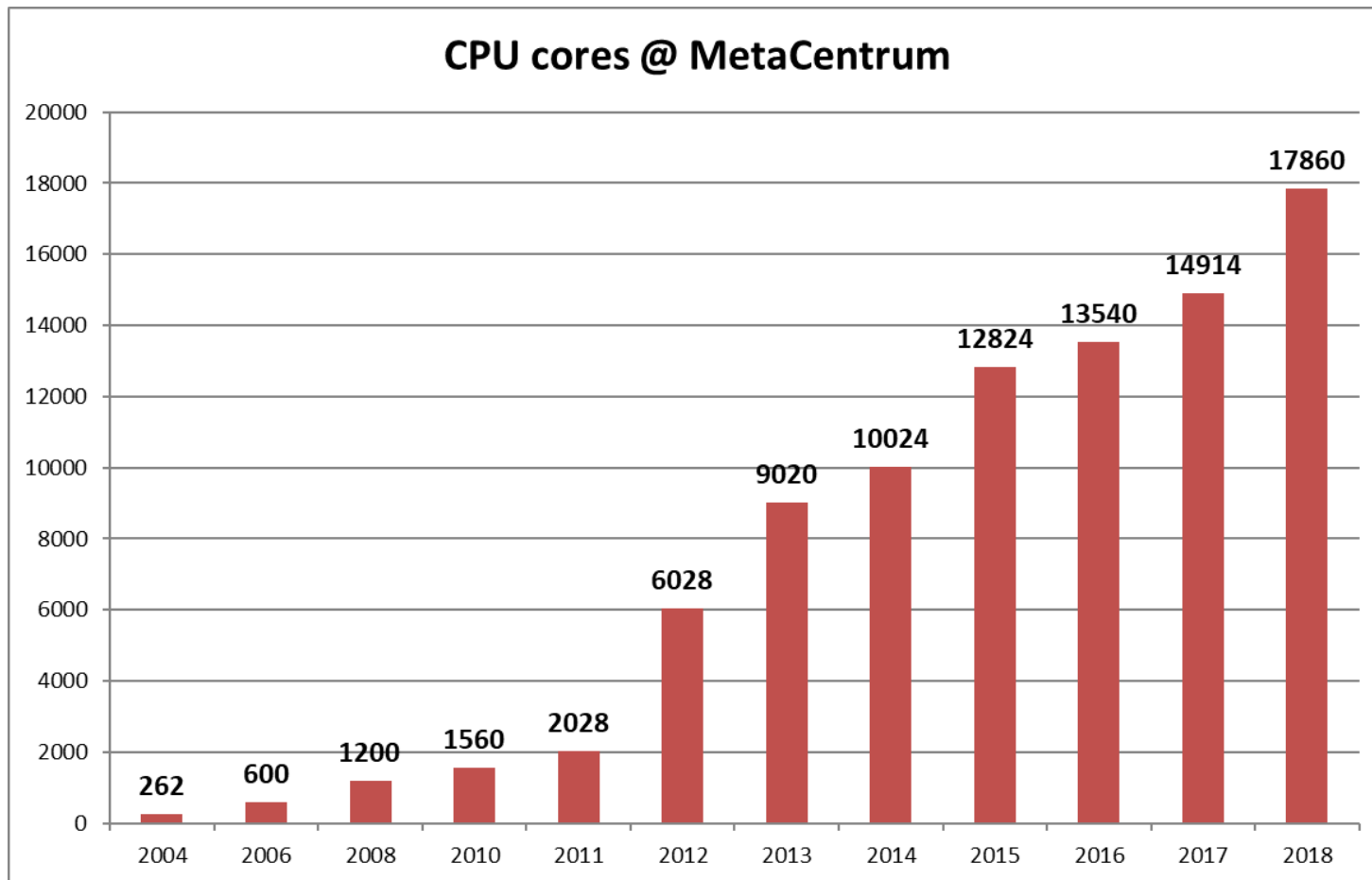
NGI pod pokličkou



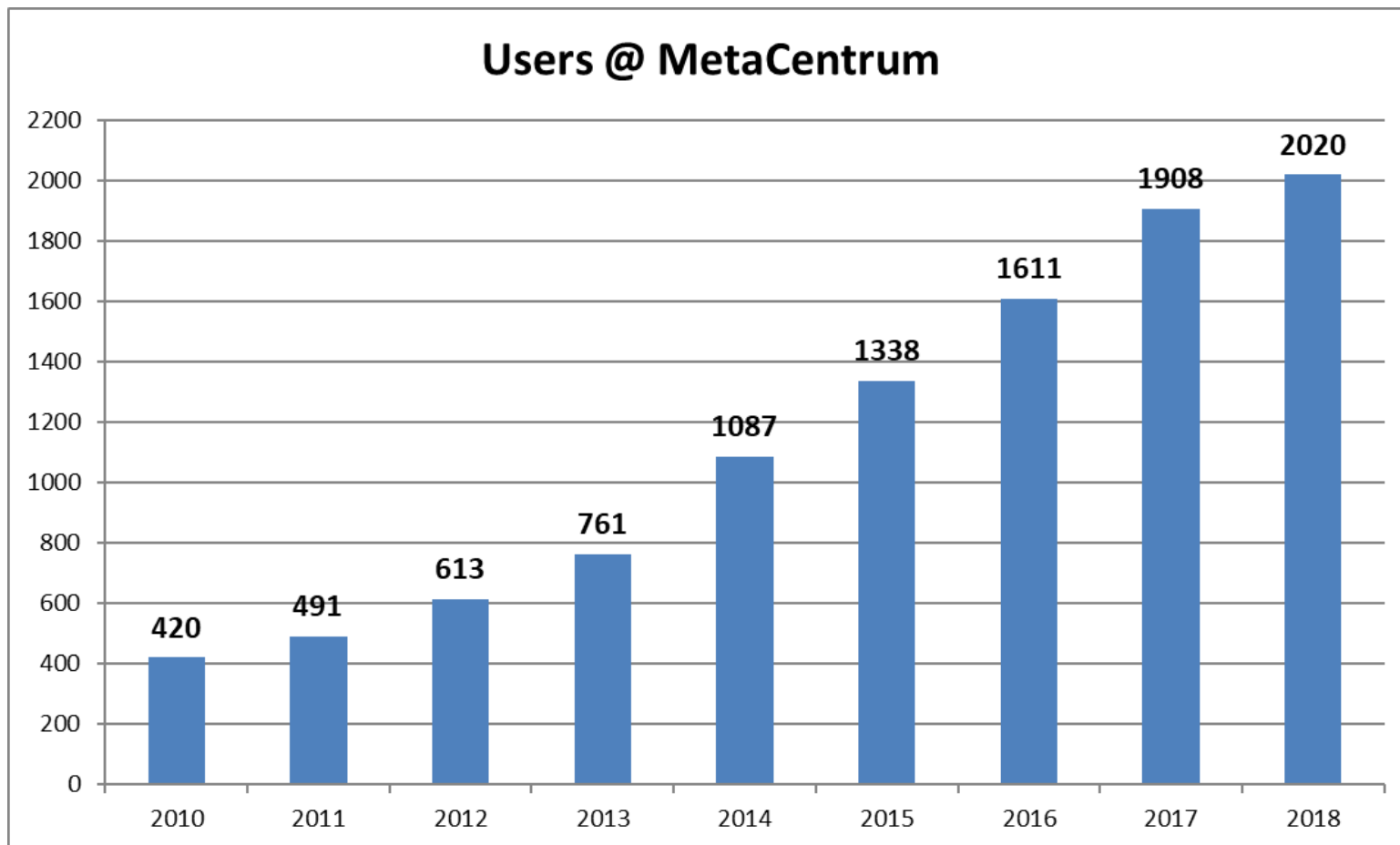
NGI v číslech...

- *cca 17860 jader, cca 600 uzlů*
- *za rok 2018:*
 - *2020 uživatelů (k 31.12.2018)*
 - *cca 5 mil. spuštěných úloh*
 - *cca 13700 úloh denně*
 - *cca 2500 úloh / uživatel*
 - *celkem propočítáno cca 11,4 tis. CPUlet*

... a grafech



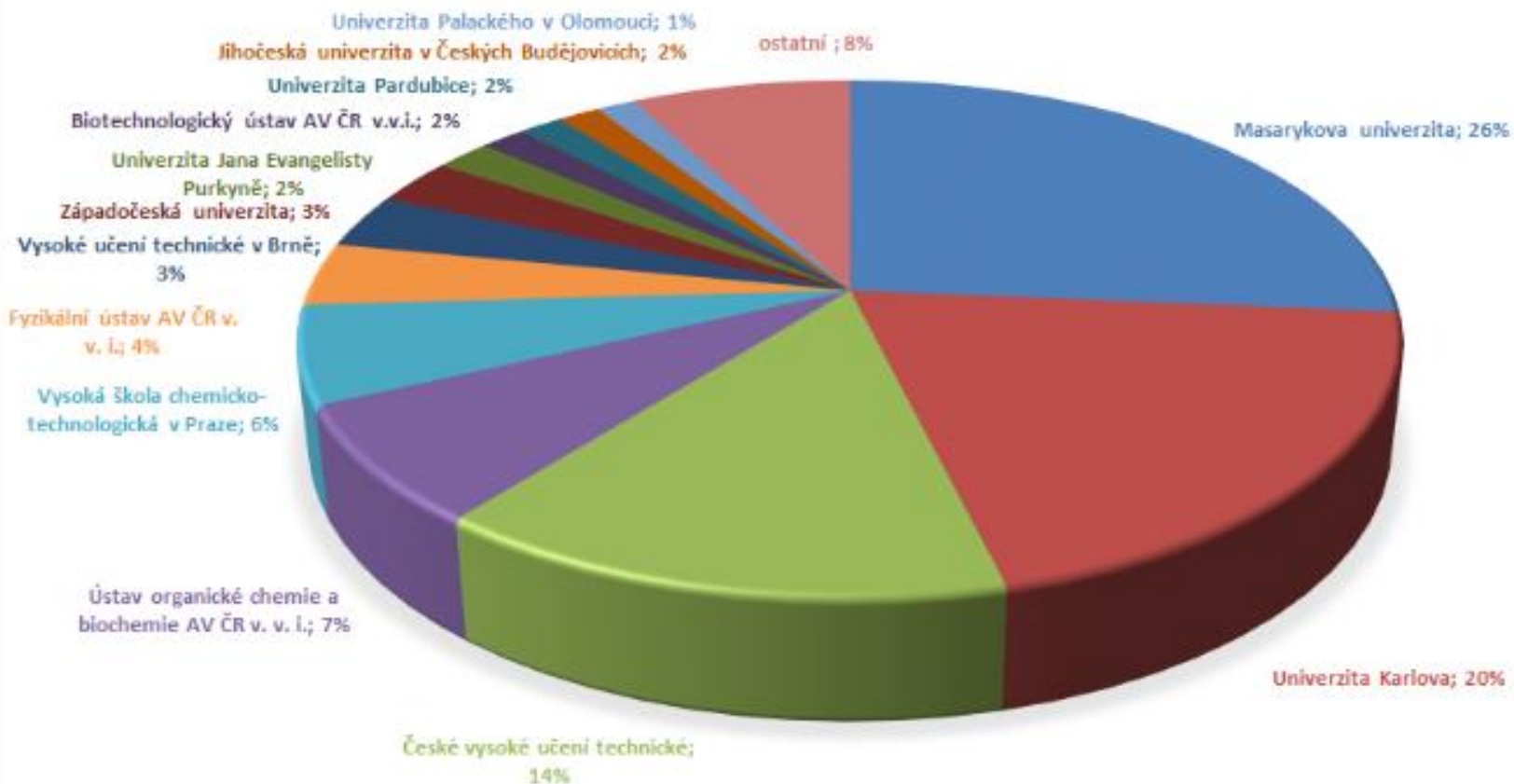
... a grafech



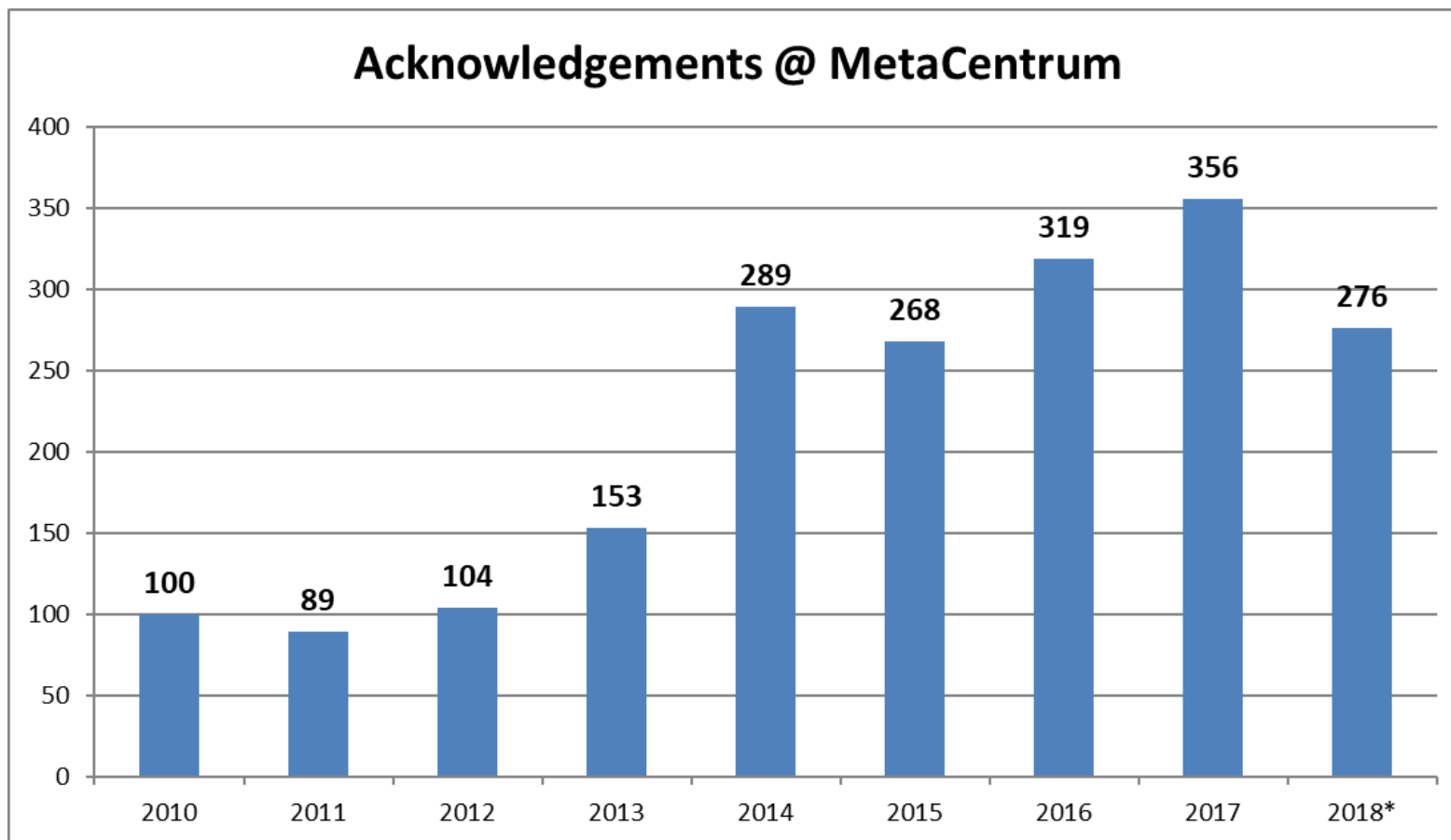
... a grafech

ORGANIZACE PODLE PROPOČÍTANÉHO ČASU

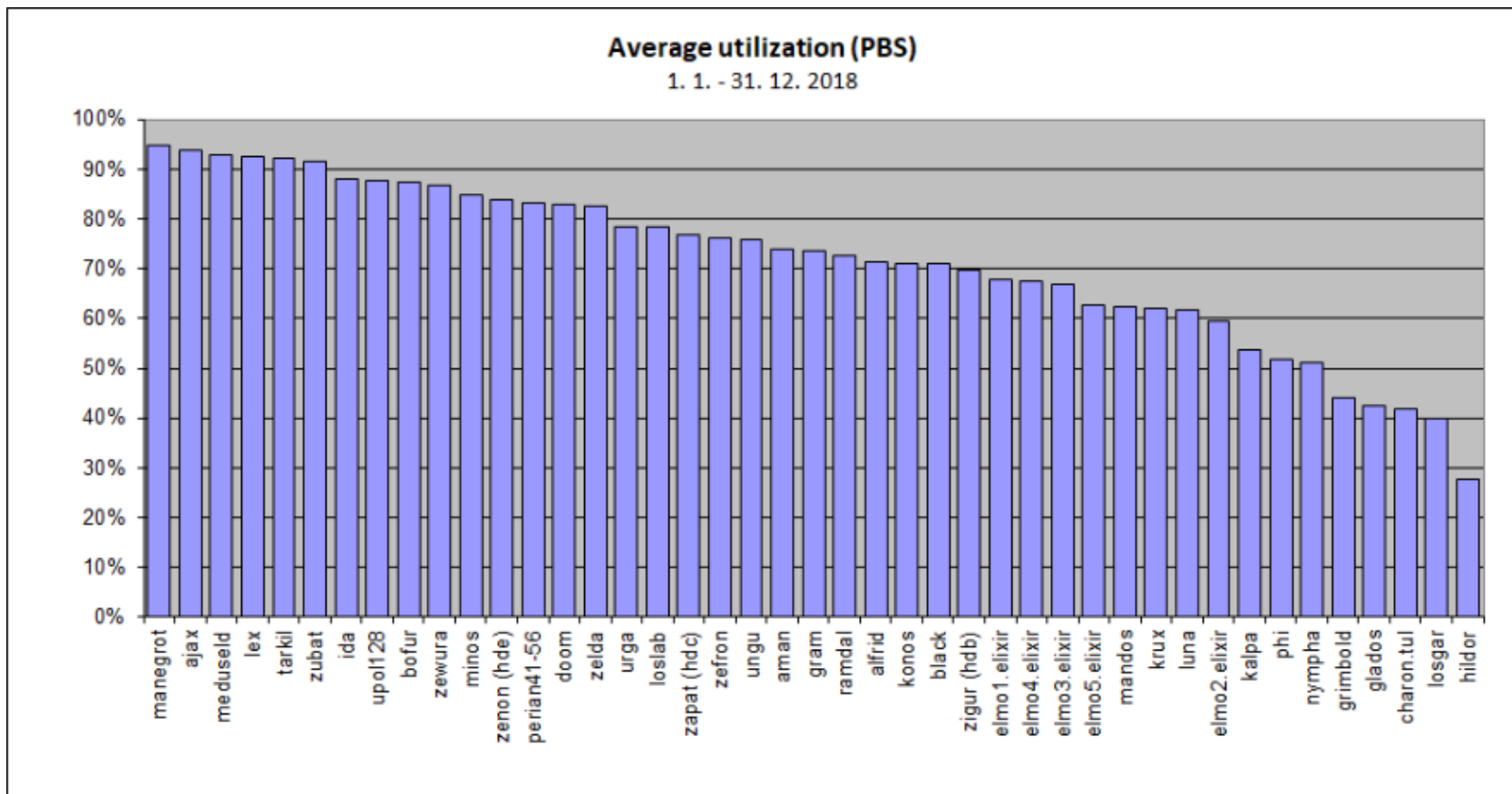
1. 1. 2018 - 31. 12. 2018



... 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, ...)
 - **new Cloud ecosystem being available**
 - MetaCloud v2.0 – based on OpenStack
-

Cloud computing

OpenNebula
MetaCentrum CERIT

Dashboard

Virtual Resources

Virtual Machines

Templates











Images

Files & Kernels

OneFlow

Virtual Machines

Refresh + Search

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

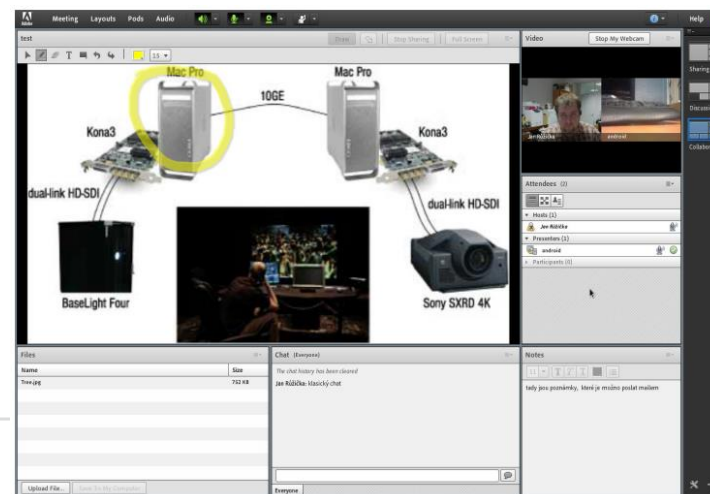
e-infrastruktura CESNET – další služby I.

• 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>
 - zaslání 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.

- **Páteří 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

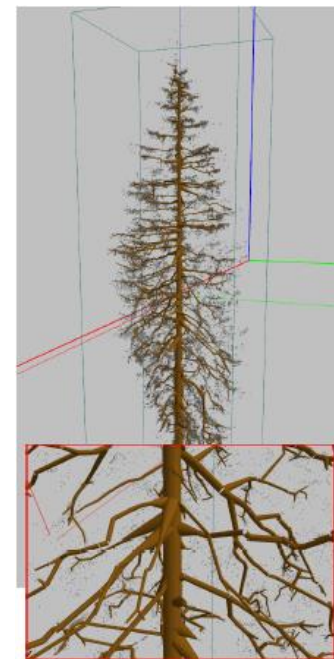
- **partner:** *Centrum výzkumu globální změny AV ČR (CzechGlobe)*
- **cíl projektu:** návrh algoritmu pro rekonstrukci 3D modelů stromů
 - z mraku nasnímaných 3D bodů
 - strom nasnímán laserovým snímačem LiDAR
 - výstupem jsou souřadnice XYZ + intenzita odrazu
 - *očekávaný výstup:* 3D struktura popisující 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

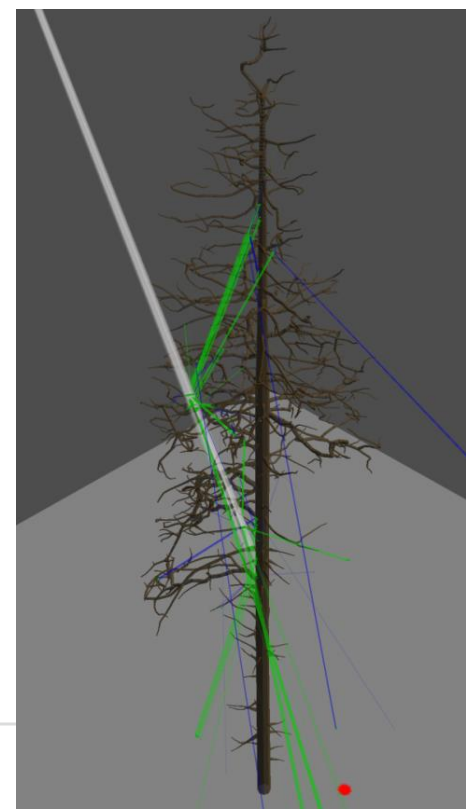
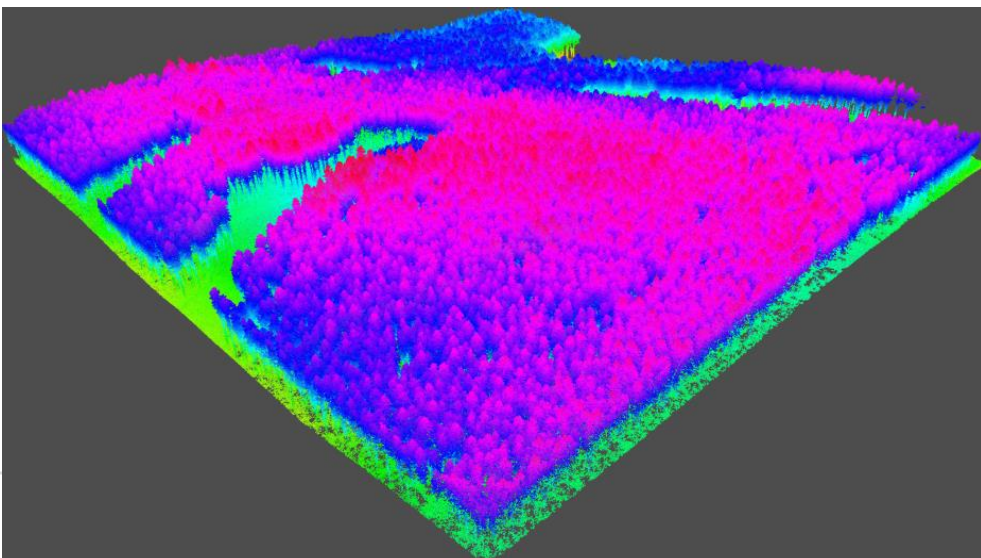
- v rámci DP navržena *inovativní metoda* rekonstrukce 3D modelů smrkových stromů
- rekonstruované modely využity v návazném výzkumu
 - získávání statistických informací o množství dřevité biomasy a o základní struktuře stromů
 - parametrizované opatřování zelenou biomasou (mladé větve + jehličky) – 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

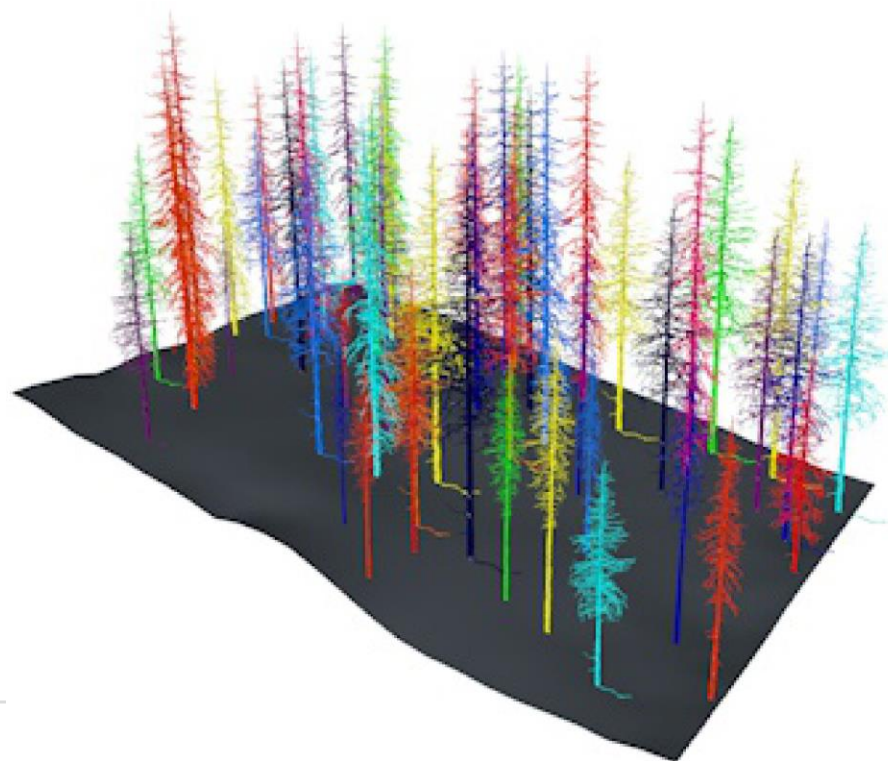
- „s jídlem roste chut“ 😊
- návazná práce
- **cíl: co nejvěrnější 3D rekonstrukce celých lesních porostů z leteckých full-wave LiDARových skenů**
 - možné využití hyperspektrálních skenů, termálních skenů, in-situ měření, ...



■ 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**
 - aplikována metoda segmentace stromů a náhrada segmentovaných bodů vhodným 3D modelem



Identifikace problémových uzavírek I.

Hledání problematických uzavírek v silniční síti ČR

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

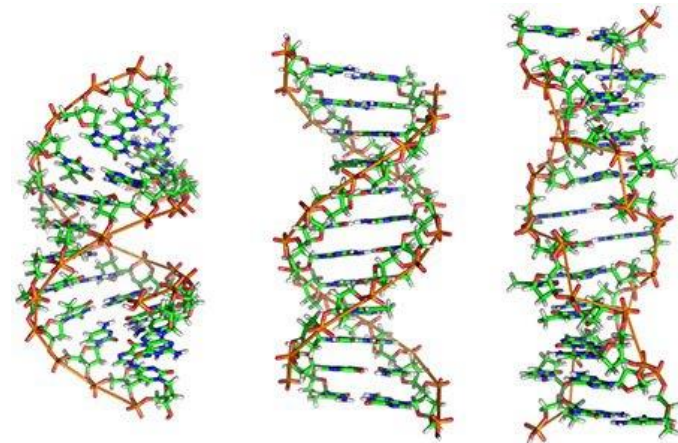
cíl projektu: nalezení metody pro identifikaci problémových uzavírek v silniční síti ČR (aktuálně Zlínského kraje)

- 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

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

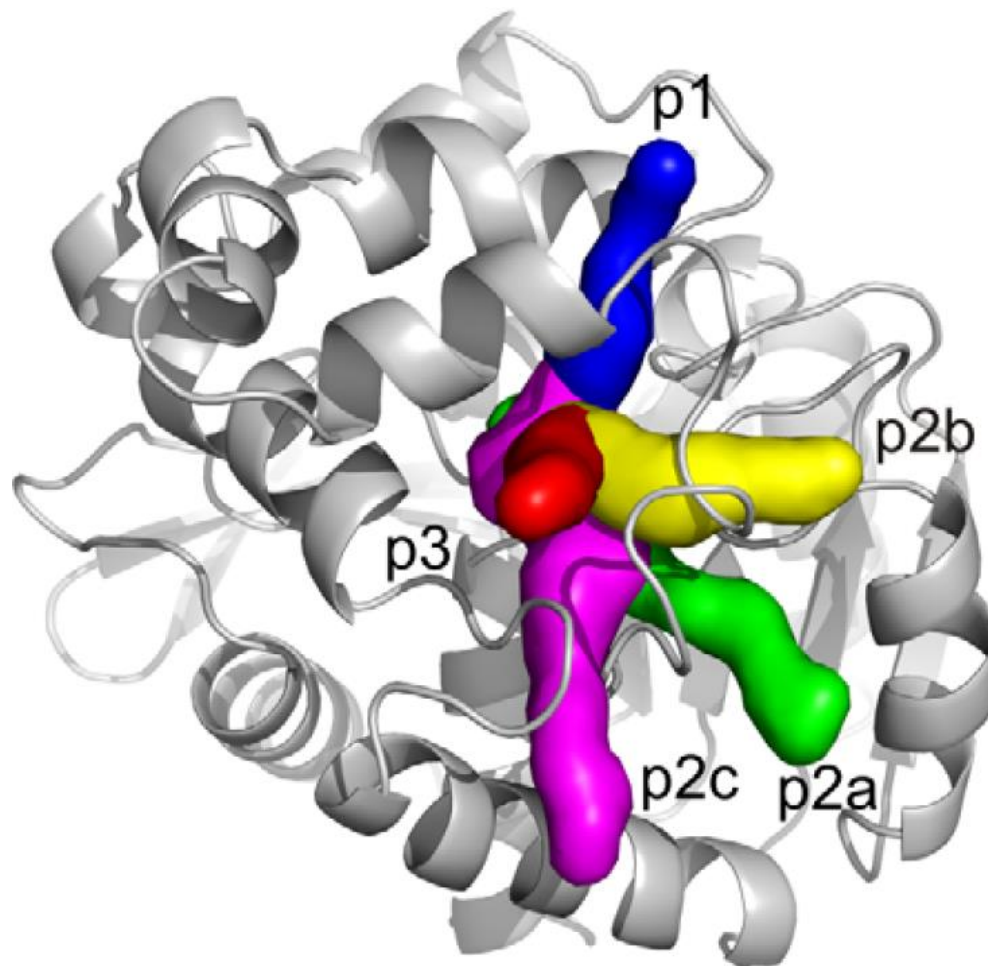
- **partner:** *Středoevropský technologický institut (CEITEC)*
- **cíl projektu:** kombinované výpočetní zpracování výstupů několika **nezávislých experimentálních metod** (vedoucí ke zjištění tvaru molekuly určitého vzorku)
 - kombinace výstupů **molekulové dynamiky, NMR a SAXS** metod
 - existuje 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.



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*
- ...

Výzkumné infrastruktury v ČR – eInfra.CZ

- *IT4innovations (Ostrava)*

- **3344** výpočetních jader („malý“ superpočítač)
- **24192** výpočetních jader („big“ supercomputer/cluster)
- vlastnosti:
 - výpočetní čas alokován **výzkumný projektům**
 - nezbytná **formální žádost** (hodnocení technické a výzkumné připravenosti, a finanční participace)
 - **veřejné soutěže** 2x ročně
 - po přijetí projektu **snazší přístup ke zdrojům** (menší počet o zdroje soupeřících uživatelů)
- účel:
 - **rozzáhlé (ověřené) výpočty** využívající homogenní infrastrukturu

Výzkumné infrastruktury v ČR – eInfra.CZ

- **Národní gridová infrastruktura (NGI) MetaCentrum**
 - cca **17000** výpočetních jader (včetně zdrojů CERIT-SC)
 - vlastnosti:
 - výpočetní čas dostupný **zcela zdarma**, bez formálních žádostí
 - dostupnost **heterogenních zdrojů** (včetně „exotických“)
 - **zdroje sdíleny mezi všemi uživateli** (občas složitější přístup k nim)
 - účel:
 - běžné **menší až středně rozsáhlé výpočty** (velké jen po předchozí domluvě)
 - příprava výpočtů/projektů pro výpočty na IT4I (~ technická připravenost)
- **CERIT-SC @ ICS MU**
 - *poskytovatel HW i SW zdrojů (vše dostupné skrze NGI)*
 - *hlavní důraz na podporu společného výzkumu s partnery centra*

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)

- **V budoucnu vše skrze eInfra.CZ?**

