

# Služby Národní Gridové Infrastruktury MetaCentrum & Centra CERIT-SC

**Tomáš Rebok**

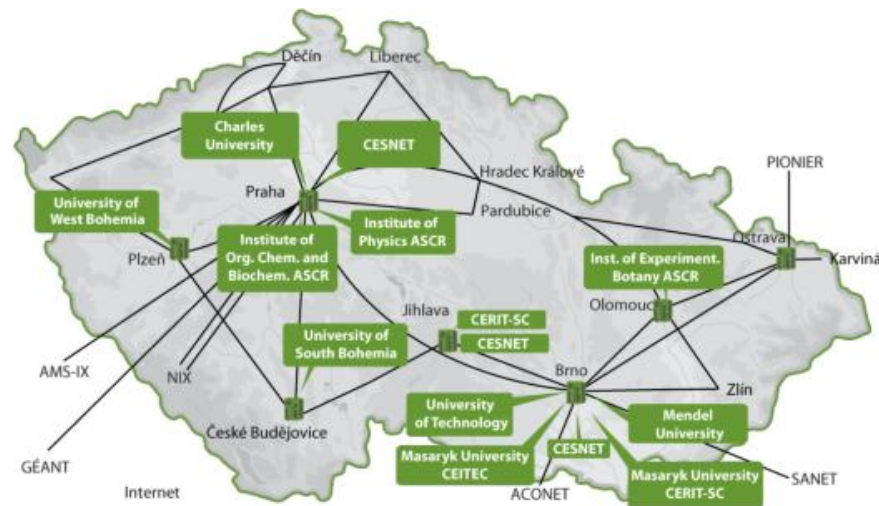
MetaCentrum, CESNET z.s.p.o.

CERIT-SC, Masarykova univerzita v Brně

(rebok@ics.muni.cz)

# Národní Gridová Infrastruktura (NGI)

- od roku 1996 **koordinovaná aktivitou sdružení CESNET (MetaCentrum)**
  - NGI 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
  - integrováno do **evropské gridové infrastruktury (EGI)**



<http://www.metacentrum.cz>

# MetaCentrum NGI

- **koordinátor národního gridu**
- pokud jste/budete vlastníci HW zdrojů, NGI Vám může pomoci s:
  - *nákupem a integrací vlastních zdrojů (existujících i plánovaných) do gridového prostředí*
    - pomoc při výběru, instalaci a provozu clusterů, jednotná správa systémového a aplikačního SW
    - správa účtů, systém pro správu úloh
    - společný provozní dohled, přizpůsobení místním potřebám
    - zajištění priority (nebo výhradního přístupu) na vlastní zdroje
- uživatelé sdružováni do tzv. **virtuálních organizací**  
= skupina uživatelů majících „něco společného“

# Virtuální organizace MetaCentrum (Meta VO)

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

- komerční subjekty také, ale 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 vytížených zdrojích



# MetaVO – základní charakteristika

- **po registraci zdroje dostupné bez administrativní zátěže**
  - ~ okamžitě (dle aktuálního vytížení – cca **700 aktiv. uživatelů**)
  - **žádné žádosti o zdroje**
- **každoroční prodlužování uživatelských účtů**
  - periodická informace o **trvajícím akademické příslušnosti uživatelů**
    - využití infrastruktury eduID.cz pro minimalizaci zátěže uživatele
  - **oznamování publikací s poděkováním MetaCentru/CERIT-SC**
    - doklad pro žádosti o budoucí financování z veřejných zdrojů
- **best-effort služba**

# Meta VO – dostupný výpočetní hardware

- **výpočetní zdroje: cca 10000 výpočetních 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
  - uzel s vysokým počtem jader: SGI UV2000
    - 288 jader, 6 TB operační paměti
  - další „exotický“ hardware:
    - uzly s GPU kartami, SSD disky, ...

<http://metavo.metacentrum.cz/cs/state/hardware.html>

# Meta VO – dostupný úložný hardware

- **cca 1 PB (1063 TB) pro pracovní data**

- centralizovaná úložiště rozmístěná ve vybraných městech ČR
  - 3x v Brně, 1x v Plzni, 1x v ČB, 1x v Praze, 1x v Jihlavě, 1x v Ostravě
- uživatelská kvóta **1-3 TB na každém z úložišť**

- **cca 19 PB pro dlouhodobá/archivní data**

- (HSM – MAID, páskové knihovny)
- „neomezená“ uživatelská kvóta

# Meta VO – dostupný software

- **~ 250 různých aplikací** (doplňováno 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**
  - **25x Ansys CFD** (Fluent + CFX), **5x Ansys Mechanical**, **60x Ansys HPC**, ...
- **strukturní biologie, bioinformatika**
  - CLC Genomics Workbench, Geneious, Turbomole, Molpro...
  - řada volně dostupných balíčků



# Meta VO – výpočetní prostředí

- **dávkové úlohy**

- popisný skript úlohy
- oznámení startu a ukončení úlohy

- **interaktivní úlohy**

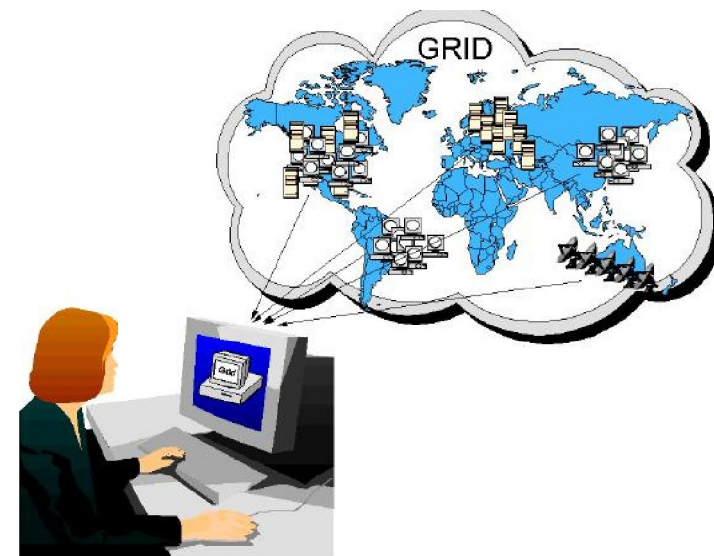
- textový i grafický režim

- **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)



# Centrum CERIT-SC

- **výzkumné centrum vybudované na ÚVT MU**
  - transformace **Superpočítačového centra Brno (SCB) při Masarykově univerzitě v Brně** do nové podoby
- **významný člen/partner Národní Gridové Infrastruktury**
  - I. **poskytovatel HW a SW zdrojů**
    - SMP uzly (1600 jader)
    - HD uzly (2624 jader)
    - **SGI UV uzel (288 jader, 6 TB paměti)**
    - úložné kapacity (~ 3,5 PB)
    - (SW výbava totožná s MetaVO)
  - II. **služby nad rámec „běžného“ HW centra –**  
**zázemí pro kolaborativní výzkum**
    - nechceme nabízet pouze „hloupou“ výpočetní sílu



<http://www.cerit-sc.cz>

# 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 – kolaborativní výzkum

## *Spolupráce a podpora výzkumu formou:*

- vedení DP a PhD prací studentů FI MU
- vedení/konzultace DP a PhD prací externích studentů
- participace na národních/evropských projektech
  - ELIXIR, ICOS, ...

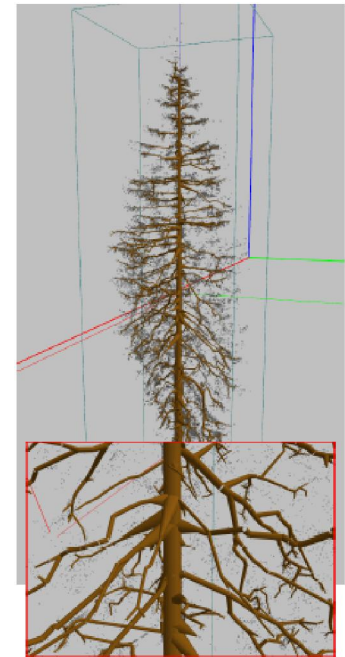
## *Silné odborné zázemí:*

- organizačně **součást Ústavu výpočetní techniky MU**
- dlouholetá tradice **spolupráce s Fakultou informatiky MU**
- dlouholetá tradice **spolupráce se sdružením CESNET**
- SCB (nyní CERIT-SC) je zakladatel MetaCentra

# Příklady spolupráce s partnery I.

## Rekonstrukce stromu z jeho laserového skenu

- partner: *CzechGlobe* (prof. Marek, doc. Zemek, dr. Hanuš, dr. Kaplan)
- **cíl projektu: návrh algoritmu pro rekonstrukci stromu (smrků)**
  - z mraku nasnímaných 3D bodů
    - strom nasnímán laserovým snímačem LIDAR
    - výstupem jsou souřadnice XYZ + intenzita odrazu
  - *očekávaný výstup*: 3D struktura popisující strom
- **hlavní problémy**: překryvy (→ mezery v datech)



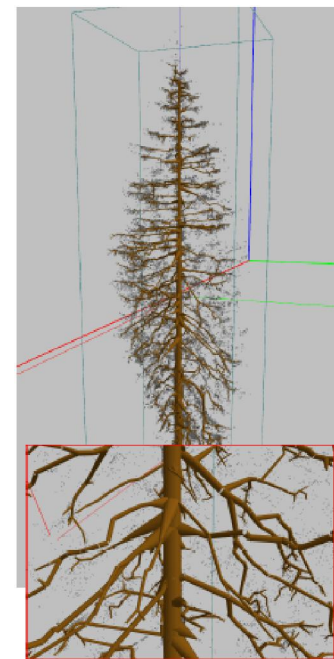
# Příklady spolupráce s partnery I.

## Rekonstrukce stromu z jeho 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

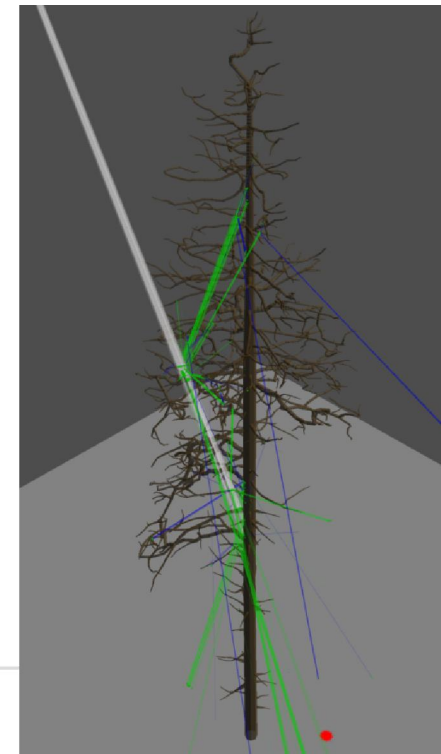
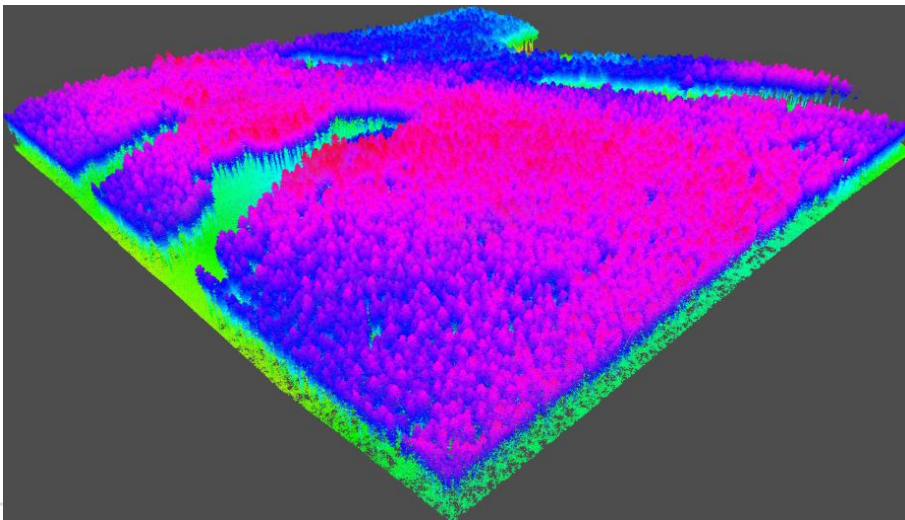




## Příklady spolupráce s partnery II.

### Rekonstrukce lesních porostů z full-wave LiDAR skenů

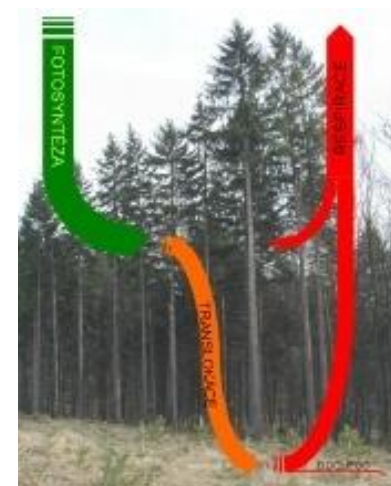
- probíhající téma PhD práce, příprava společného projektu
- **cíl: co nejvěrnější 3D rekonstrukce celých lesních porostů z leteckých full-wave LiDARových skenů**
  - možné využití hyperspektrálních skenů, termálních skenů, in-situ měření, ...



## ■ Příklady spolupráce s partnery III.

### ■ Použití neuronových sítí pro doplňování chybějících dat eddy-kovariančních měření

- partner: *CzechGlobe* (prof. Marek, dr. Pavelka)
- **cíl projektu: nalezení nové, plně automatické metody pro doplňování chybějících měření**
  - formou učení na historických datech
    - *doprovodné charakteristiky* – teplota, tlak, vlhkost, ...
- **hlavní problémy:**
  - nutnost brát v úvahu i historická data
  - les se vyvíjí (roste)





# ■ Příklady spolupráce s partnery IV.

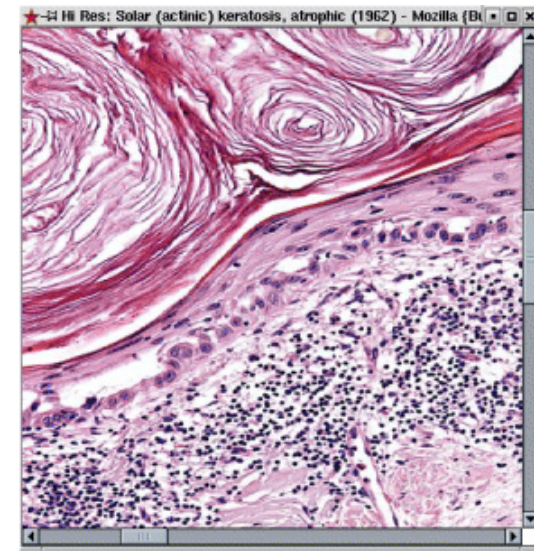
## Identifikace oblastí zasažených geometrickými distorzemi v leteckých skenech krajiny

- partner: *CzechGlobe* (prof. Marek, dr. Hanuš)
- **cíl projektu: nalezení nové, plně automatické metody pro identifikaci oblastí, ve kterých došlo při skenování k náhlému vychýlení letadla**
  - a tím zkreslení skenovaných dat
  - → *analýza obrazu*
  - existující přístupy vhodné spíše pro detekci problémů ve skenech objektů pravidelných tvarů (domy) než pro detekci v rozmanitém porostu
- **hlavní problémy: rozmanitá struktura stromů**

# Příklady spolupráce s partnery V.

## ■ Virtuální mikroskop, patologické atlasy

- partner: *LF MU* (doc. Feit)
- **cíl projektu: implementace virtuálního mikroskopu pro dermatologický atlas (webová aplikace)**
  - zobrazuje skeny tkání
    - rozlišení až 170000x140000 pixelů
    - složeno z dlaždic (až 30000 ks)
  - umožňuje „doostřovat“ jako skutečný mikroskop
  - <http://atlases.muni.cz/>
- **hlavní problémy:**
  - optimalizace zpracování snímků, autentizace



## ■ Příklady spolupráce s partnery VI.

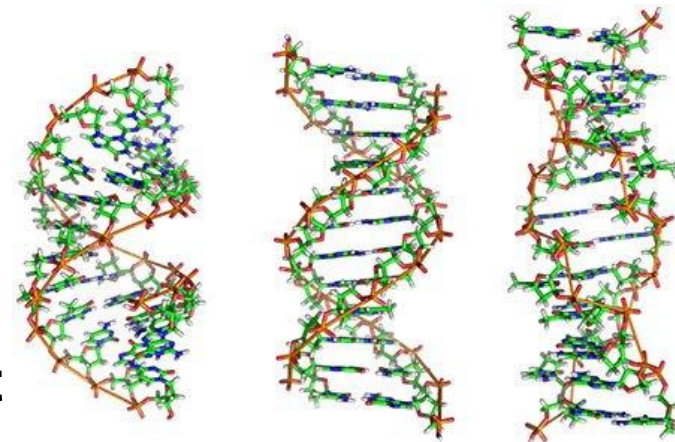
### Hledání problematických uzavírek v silniční síti ČR

- partner: *Centrum Dopravního Výzkumu v.v.i., Olomouc*  
(dr. Bíl, dr. Vodák)
- **cíl projektu: nalezení metody pro identifikaci problémových uzavírek v silniční síti ČR**
  - Identifikace uzavírek vedoucích (dle definovaných ohodnocovacích kritérií) k problémům v dopravě
- **hlavní problémy: výpočetní náročnost**

## Příklady spolupráce s partnery VII.

### Sekvenování *Trifolium pratense* (Jetel luční)

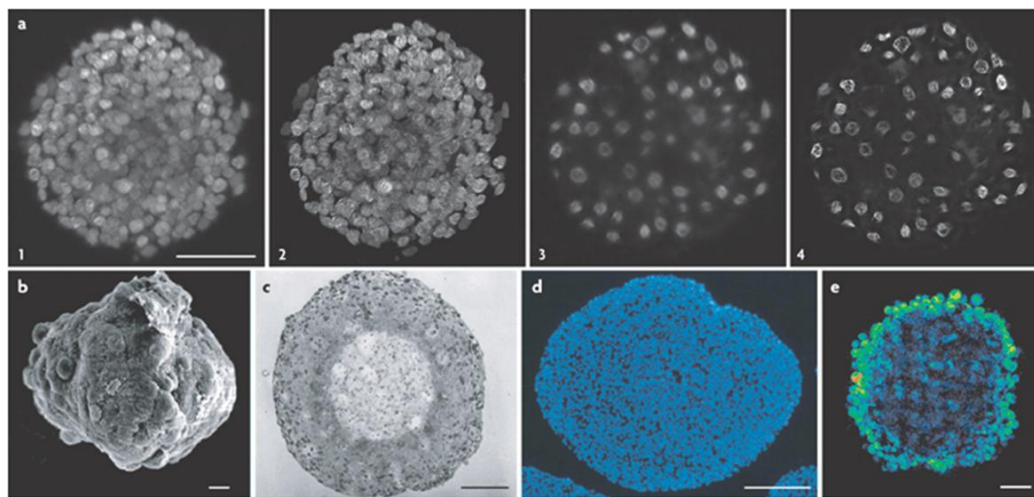
- partner: Ústav experimentální biologie PŘF MU
- cíl: optimalizace dostupných nástrojů pro skládání a opravy chyb v DNA kódech
  - *analýzy DNA (nejen) jetele vedou k výpočetně náročným problémům*
    - ~ 500 GB paměti
      - optimalizováno na cca 15% využití
    - výpočet trvá týdny/měsíce
- hlavní problém: výpočetní náročnost



# Příklady spolupráce s partnery VIII.

## Segmentace živých buněčných kultur v mikroskopických snímcích

- partner: *Jihočeská univerzita v ČB*
- cíl: identifikace zajímavých/důležitých objektů ve snímcích živých buněčných kultur + filtrace šumu
- implementováno v jazyce C a CUDA (GPU akcelerátory)
- dosažené zrychlení: 10x – 1000x



## ■ Příklady spolupráce s partnery IX.

- **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*
- **Fotometrický archív astronomických snímků**
- **Extrakce fotometrických údajů o objektech z astronomických snímků**
  - *2x partner: Ústav teoretické fyziky a astrofyziky PŘF MU*
- **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*
- ...

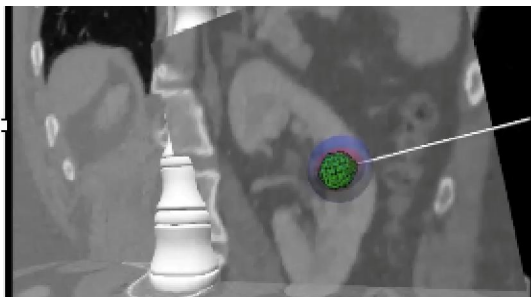


## Aktuálně ustavovaná spolupráce: Modelování měkkých tkání v reálném čase

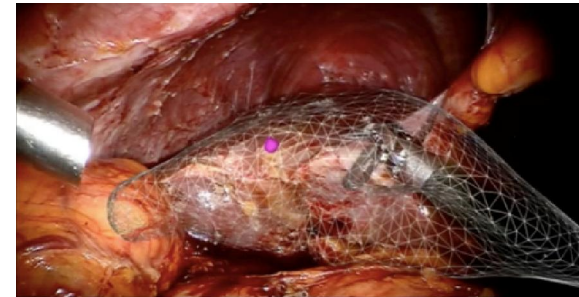
- Využití biomechanických modelů vytvořených z pre-operativních dat pacientů (CT, MRI) pro aplikace v medicíně
  - reálný čas [25Hz] nebo dokonce hmatová (haptická) interakce [ $>500\text{Hz}$ ]



Simulátor operace kataraktu  
MSICS



Kryoablace: plánování  
umístění elektrody



Laparoskopie: vizualizace  
vnitřních struktur

Chirurgické trenážery

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

# Aktuálně ustavovaná spolupráce:

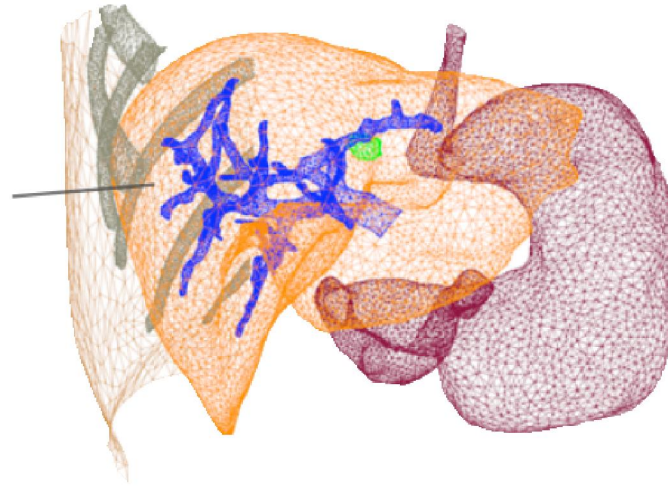
## Aspekty simulací měkkých tkání

### Nasazení v lékařské praxi

řešení reálných problémů,  
metriky pro vyhodnocení  
benefitu, robustnost,  
kompatibilita s normami

### Modelování interakcí

Modelování elastických  
kontaktů  
Simulace řezání, šití, vpichu  
jehly  
Haptická interakce



### Numerické metody řešení

přímé a iterativní solvery, paralelní a  
akcelerované algoritmy (např. GP-  
GPU), interpolační metody a  
generování sítí

### Mechanické a fyzikální modelování

metoda konečných prvků, mesh-  
less metody, ale také  
elektrofyzologie, heat-transfer

### Validace a verifikace modelů

správné řešení rovnic (porovnání se  
standardním software), řešení  
správných rovnic (porovnání s  
realitou, experiment)

- **mezinárodní spolupráce** s instituty (IHU Strasbourg, INRIA France) a univerzitami (University of British Columbia, Koç University, Istanbul)
- **nabídka spolupráce v rámci ČR** (biomechanické modelování, experimenty, kliničtí partneři)



# Závěr

## Národní Gridová Infrastruktura MetaCentrum (CESNET)

- správa a poskytování **infrastruktury pro akademickou komunitu**
- výpočetní a úložné služby, SW aplikace
- poskytujeme **výjezdní hands-on školení**

## Centrum CERIT-SC (ÚVT MU)

- nejen poskytovatel zdrojů (integr. do NGI), ale **výzkumný partner**
  - aplikace ICT ve vědních oborech partnerů (**výzkumné spolupráce**)
  - participace na **společných projektech**

## Další služby Velké infrastruktury Cesnet

- videokonferenční služby (H.323 + webové), speciální přenosy
- úložné služby – datové archívy, Filesender, OwnCloud (~ DropBox)
- bezpečnost, certifikační autorita (osobní i serverové certifikáty)
- síť, sledování provozu, analýza incidentů, Eduroam, EduID.cz, ...



EUROPEAN UNION

EUROPEAN REGIONAL  
DEVELOPMENT FUND  
INVESTING IN YOUR FUTURE



OP Research and  
Development for Innovation

Projekt CERIT Scientific Cloud (reg. no. CZ.1.05/3.2.00/08.0144) byl podporován operačním programem *Výzkum a vývoj pro inovace*, 3 prioritní osy, podoblasti 2.3 *Informační infrastruktura pro výzkum a vývoj*.

<http://metavo.metacentrum.cz>

<http://www.cerit-sc.cz>