MetaCentrum

ÚVT

CESNET

MetaCentrum & CERIT-SC

Tomáš Rebok

MetaCentrum, CESNET z.s.p.o.

CERIT-SC, Masarykova univerzita

(rebok@ics.muni.cz)

Obsah

- Výpočetní služby
- Služby pro podporu vědy a výzkumu
- Úložné služby
- Služby pro podporu vzdálené spolupráce
- Další podpůrné služby

- Školící hands-on seminář

Výpočetní služby

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**
  - integrováno do **evropské gridové infrastruktury (EGI)**

http://www.metacentrum.cz

Výpočetní cluster

- skupina vzájemně propojených „běžných“ počítačů

(dříve)

Výpočetní cluster

- skupina vzájemně propojených „běžných“ počítačů

(nyní)

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* ***(slabá vs. silná integrace)***
    - **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**
    - **priorita nebo výhradní přístup na své zdroje**
- uživatelé sdružováni do tzv. **virtuálních organizací**
  - = skupina uživatelů majících „něco společného“

MetaCentrum VO (Meta VO)

- **přístupné zaměstnancům a studentům VŠ/univerzit, AV ČR, výzkumným ústavům, atp.**
  - komerční subjekty pouze pro veřejný výzkum
- nabízí:
  - **výpočetní zdroje**
  - **úložné kapacity**
  - **aplikační programy**

http://metavo.metacentrum.cz

- po registraci **k dispozici zcela zdarma**
  - „placení“ formou **publikací s poděkováním**

→ prioritizace uživatelů při plném vytížení zdrojů

MetaVO – základní charakteristika

- po registraci **zdroje dostupné bez administrativní zátěže**
  - → ~ okamžitě (dle aktuálního vytížení)
  - **žádné žádosti o zdroje**

- **každoroční prodlužování** uživatelských účtů
  - periodická informace o **trvající 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 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**
  - uzel **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, …

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

Meta VO – dostupný úložný hardware

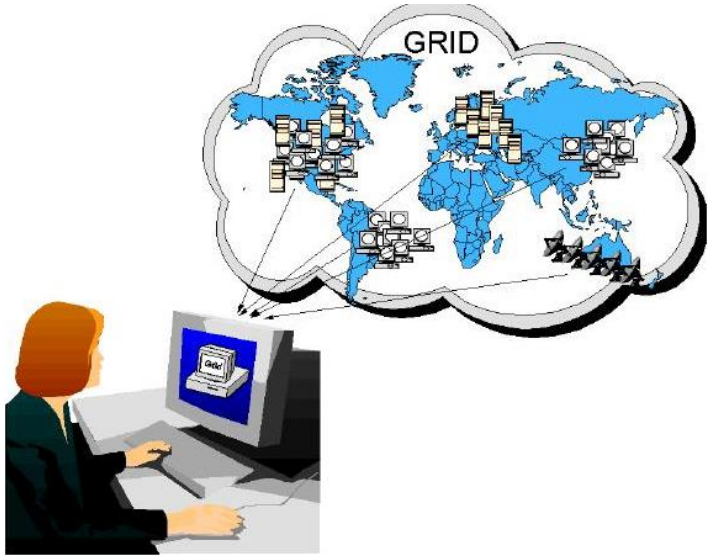
- **cca 3 PB pro pracovní data**
  - úložiště v Brně, Plzni, ČB, Praze
  - uživatelská kvóta **1-3 TB na každém z úložišť**
- **cca 22 PB pro dlouhodobá/archivní data**
  - (HSM – MAID, páskové knihovny)
  - **„neomezená“ uživatelská kvóta**

http://metavo.metacentrum.cz/cs/state/nodes

Meta VO – dostupný software

- **~ 350 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 (**512 cores!**), OpenFoam, …
- **strukturní biologie, bioinformatika**
  - CLC Genomics Workbench, Geneious, Turbomole, Molpro, …
  - řada volně dostupných balíků
- **…**

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

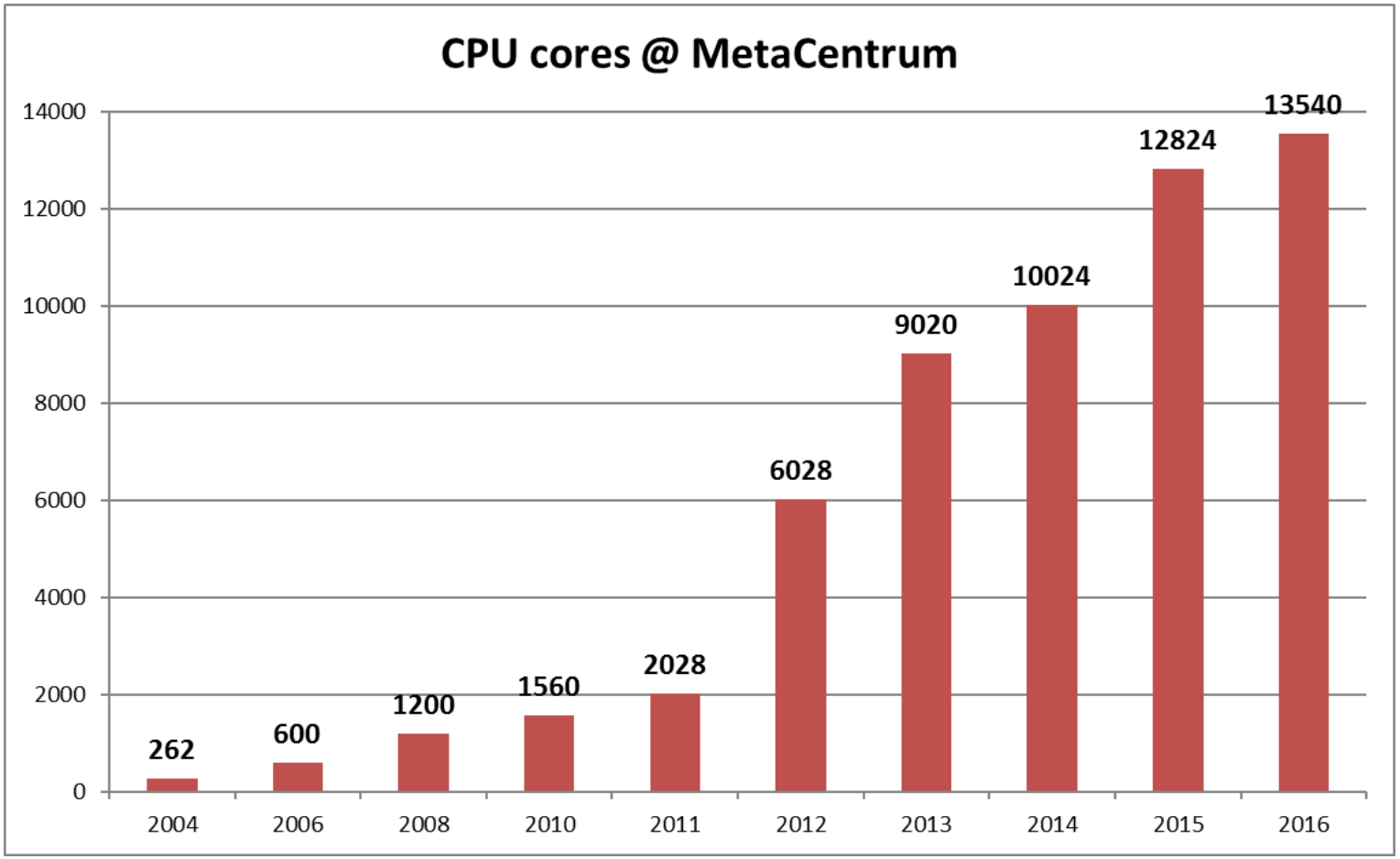
    možnost vyladit si obraz a přenést ho do MetaCentra/CERIT-SC (Windows, Linux)

Meta VO v číslech…

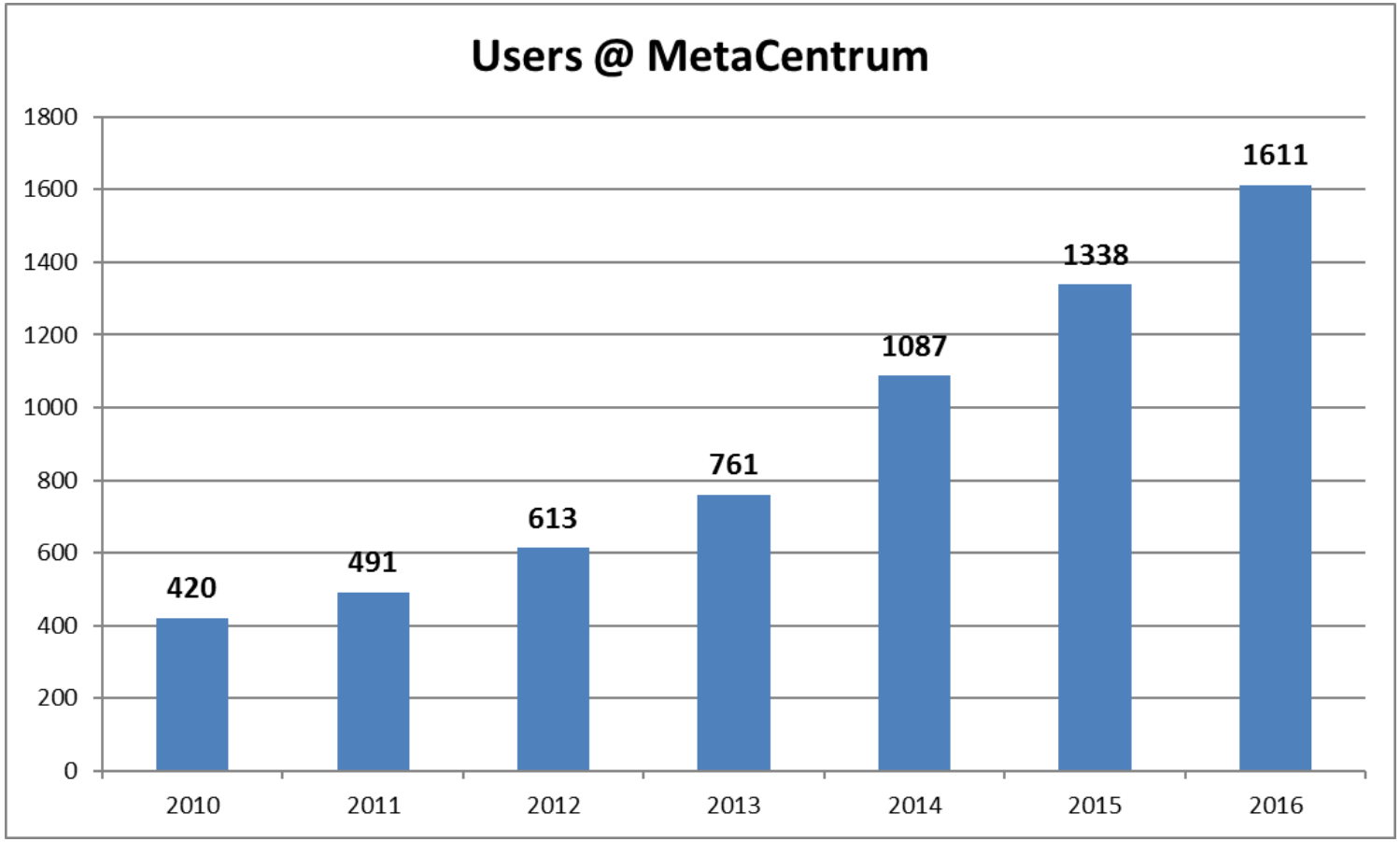
- *cca 13540 jader, cca 600 uzlů*
- *za rok 2016:*
  - ***1611 uživatelů*** *(k 31.12.2016)*
  - ***cca 3,6 mil. spuštěných úloh***
    - *cca 9800 úloh denně*
    - *cca 2200 úloh/uživatel*
  - ***propočítáno***

    cca 9,5 tis. CPUlet

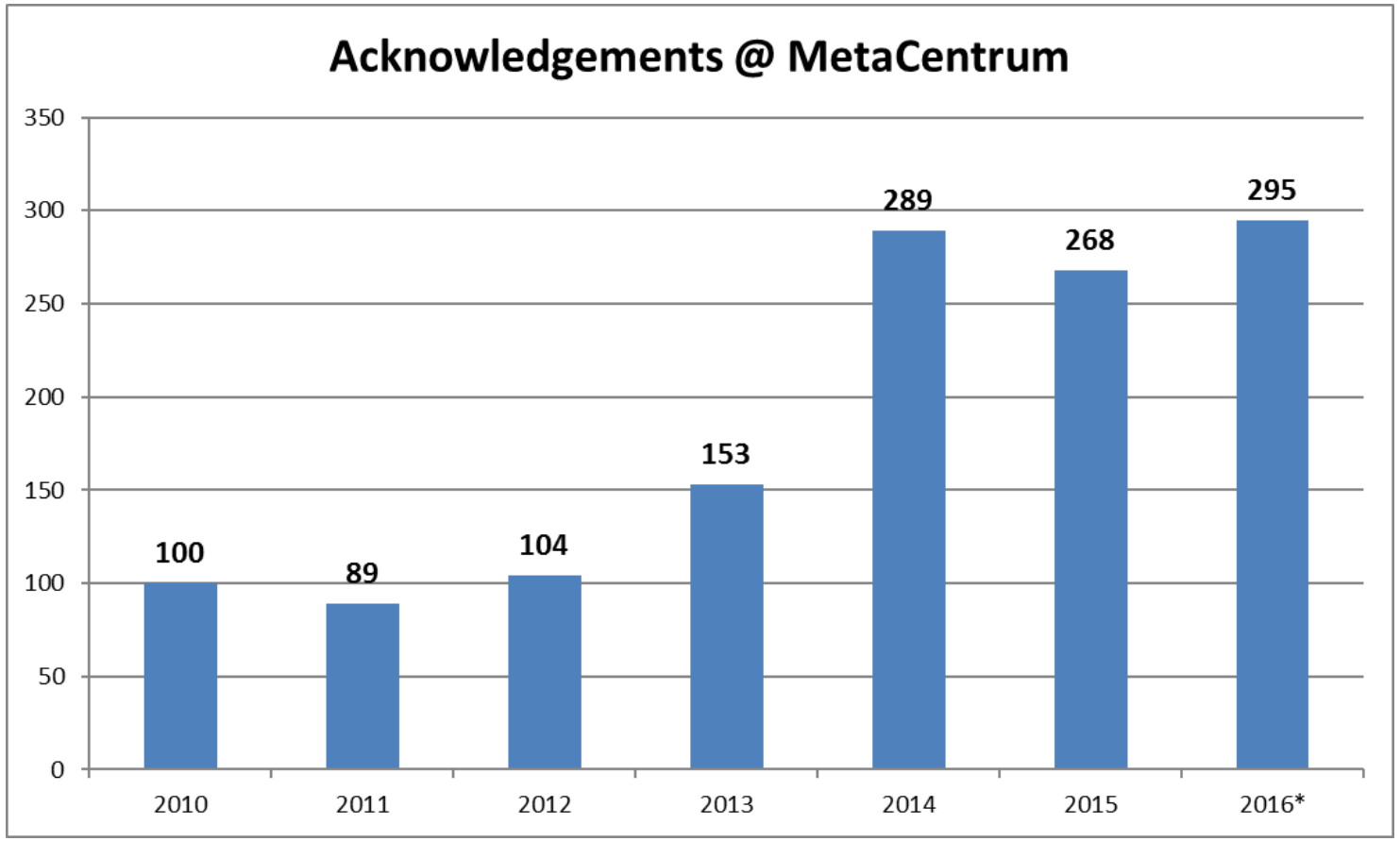
… a grafech


CPU cores @ MetaCentrum
14000
12000
10000
8000
6000
4000
2000
0
262
600
1200
1560
2028
6028
9020
10024
12824
13540
2004
2006
2008
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016

… a grafech


Users @ MetaCentrum
1800
1600
1400
1200
1000
800
600
400
200
0
420
491
613
761
1087
1338
1611
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016

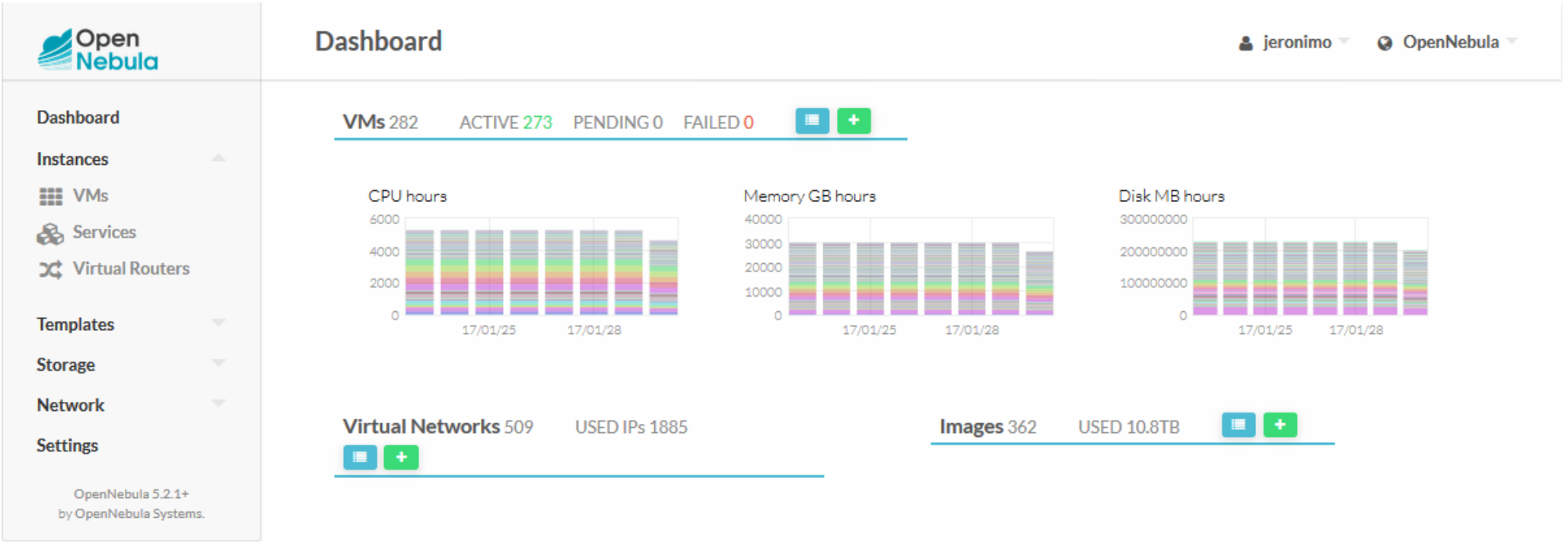
… a grafech


Acknowledgements @ MetaCentrum
350
300
250
200
150
100
50
0
100
89
104
153
289
268
295
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016*

Meta VO – cloudové služby I.

- ***využití virtualizace:***
  - **výhody:** plná kontrola na úrovni OS, realizace výpočtu plně na uživateli
  - **nevýhody:** vhodné pro nasazení menšího rozsahu
  - *poskytovány **předpřipravené** virtuální obrazy + **možnost vlastních obrazů** (Windows, Linux)*
- primárně určeno **pro testování a výpočty, nikoli pro webhostingové služby**
  - výpočty, testy, výzkum, vývoj, …

Meta VO – cloudové služby II.



Meta VO – Hadoop

- ***Apache Hadoop***
  - **open/source platforma** určená pro zpracování **rozsáhlých objemů dat**
    - je vhodná pouze pro specifické typy výpočtů
      založené na tzv. Map-Reduce výpočetním modelu
      (data jsou rozprostřena přes výpočetní uzly, výpočty „putují“ za nimi)
- Hadoop cluster – aktuálně 416 CPU
- v rámci infrastruktury je dostupný i se standardními rozšířeními
  - Spark, Hive, Pig, …
  - viz https://metavo.metacentrum.cz/export/sites/meta/cs/seminars/seminar2017/demo-zeman.pdf

https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Hadoop

Meta VO – jak se stát uživatelem?

- ***podejte si přihlášku***
  - http://metavo.metacentrum.cz , sekce „*Přihláška*“
  - EduID.cz => **ověření Vaší akademické identity** proběhne s využitím Vaší domovské instituce
- ***seznamte se s dokumentací a základy OS Linux***
  - http://metavo.metacentrum.cz , sekce „*Dokumentace*“
  - *Linux* – viz dostupné veřejné zdroje
- ***počítejte***

Pozice výpočetních infrastruktur v ČR I.

- *IT4innovations (Ostrava)*
  - **3312 výpočetních jader** („malý“ superpočítač/cluster)
  - **24192 výpočetních jader** („velký“ superpočítač/cluster)
  - parametry:
    - výpočetní čas přidělován **formou výzkumného projektu**
    - nutná **formální žádost** (posuzována vědecká a technická připravenost + finanční participace)
    - **veřejné soutěže** vypisovány 2x ročně
    - v případě akceptace žádosti **snazší dostupnost zdrojů** (minimum souběžně počítajících uživatelů)
  - určení:
    - **rozsáhlé (odladěné) výpočty na +/- homogenní infrastruktuře**

Pozice výpočetních infrastruktur v ČR II.

- ***Národní Gridová Infrastruktura (NGI) MetaCentrum***
  - cca **13500 výpočetních jader** (vč. zdrojů CERIT-SC)
  - parametry:
    - výpočetní čas **zdarma dostupný bez explicitních žádostí o zdroje**
    - dostupnost různých typů HW, včetně „exotického“
    - **zdroje sdíleny s ostatními uživateli** (občas horší dostupnost)
  - určení:
    - **běžné výpočty menšího až středního rozsahu** (výpočty většího rozsahu možné jen po domluvě)
    - **příprava výpočtů** pro počítání na IT4innovations (~ technická připravenost)
- ***CERIT-SC @ ÚVT MU***
  - *poskytovatel HW a SW zdrojů do produkčního prostředí NGI*
  - *hlavní důraz na **služby pro podporu vědy a výzkumu***

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 (1960 jader)
- HD uzly (2624 jader)
- **SGI UV uzel (288 jader, 6TB paměti)**
- **SGI UV uzel (384 jader, 6TB paměti)**
- **Xeon Phi akcelerátory**
- úložné kapacity (~ 3,5 PB)
- SW výbava totožná s MetaVO

II. služby nad rámec „běžného“ HW centra –
zázemí pro kolaborativní výzkum

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 + oblasti pro podporu uživatelského výzkumu

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 – formy výzkumu I.

Formy výzkumu/spolupráce

I.Participace na projektech:

- **e-infrastrukturní/IT projekty** *(úzká spolupráce s CESNET/MetaCentrum NGI)*
  - projekty zaměřené na **vylepšování služeb a technologií e-infrastruktury**
  - *DataGrid, EGEE, EMI, EGI InSPIRE, EUAsiaGrid, CHAIN, Thalamos, …*
    - **aktivní participace (výzkumná i organizační – *EGI Council Chair*)**
- **kolaborativní projekty**
  - participace a podpora **projektů spolupracující věd** (výzkumných partnerů)
    - **návrh a vývoj nových metod, algoritmů a principů pro realizaci výzkumných infrastruktur a top-level výzkumu**
    - **výpočetní a úložné kapacity + know-how pro práci s nimi**
  - *ELIXIR-CZ, BBMRI, Thalamoss, SDI4Apps, Onco-Steer, CzeCOS/ICOS, …*
  - *KYPO, 3M SmartMeterů v cloudu, MeteoPredikce, …*

CERIT-SC – formy výzkumu II.

Formy výzkumu/spolupráce

II.Výzkumné aktivity („malé“ projekty)**:**

- **e-infrastrukturní/IT výzkum** *(úzká spolupráce s CESNET/MetaCentrum NGI)*
  - výzkum a vývoj **nástrojů, technologií a služeb pro oblast e-infrastruktur**
- **kolaborativní výzkum**
  - výzkum **ve spolupráci s uživateli / výzkumnými partnery**
  - (týmy i jednotlivci)
- **často přechází v projektový výzkum/spolupráci**
- **příklady výzkumu/výzkumných spoluprací** – viz dále

CERIT-SC – podpora výzkumu

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

CERIT-SC – in-house výzkum

Vlastní (hlavní) výzkumné směry

- **udržujeme a rozvíjíme vlastní expertizu na potřebné úrovni**
  - tak, abychom touto mohli podpořit uživatele e-infrastruktury
- **dva obecné směry – intenzivní výpočty, velká data**
  - jasná tematická souvislost s aplikacní oblastí
  - bez nutnosti bezprostředního využití
- **explicitní financování v projektu OP VVV**

Intenzivní výpočty

- optimalizace kódu, akcelerace výpočtů na akcelerátorech (GPU, Xeon Phi, ...)

Velká data

- zpracování a analýzy velkých objemů dat, dolování informací

e-Infrastrukturní/IT výzkum

Rozvrhový plánovač I.

Navržen a vyvinut nový plánovač nahrazující dosavadní frontový

- návrh realizován v rámci disertační práce
- **experimentální nasazení** od července 2014

Hlavní funkce:

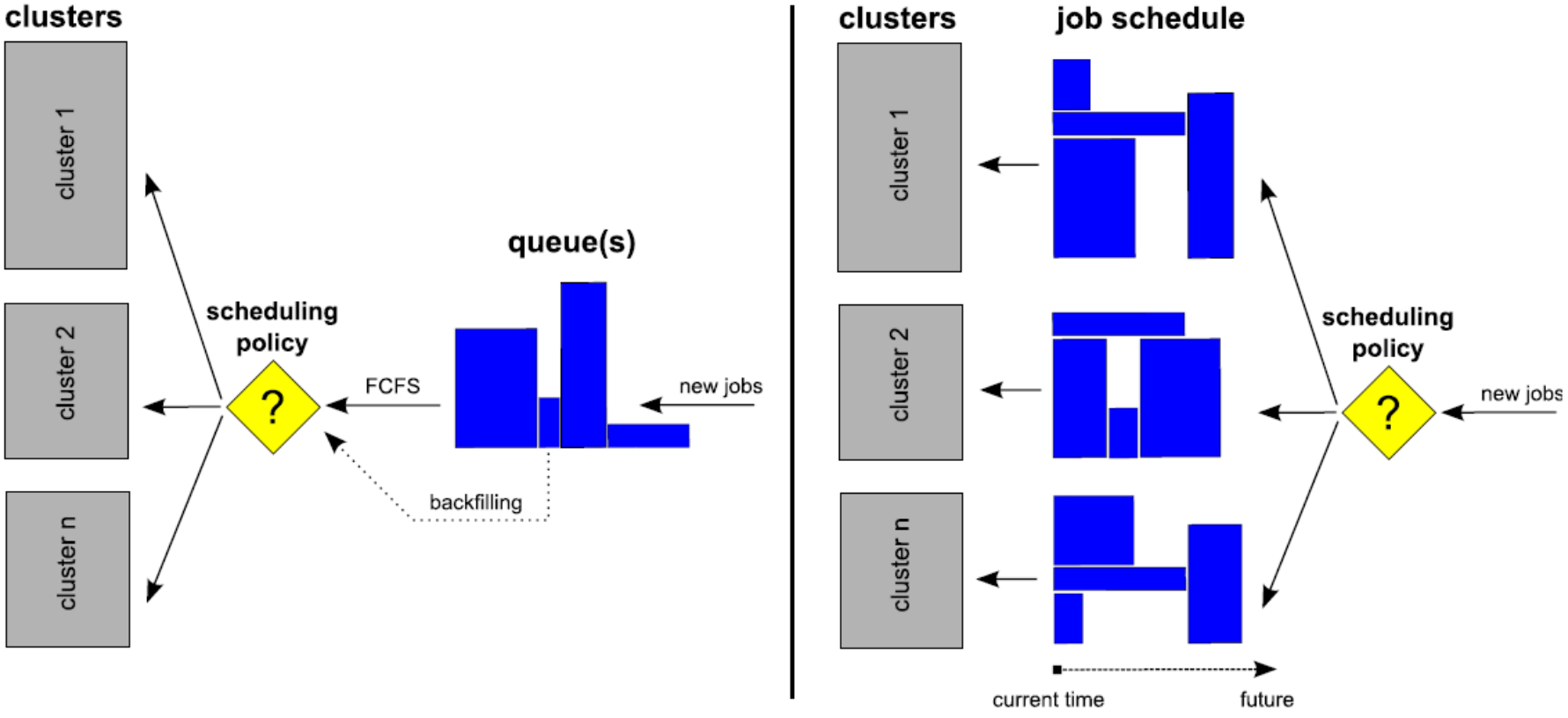
- vytváří se **plán (rozvrh) spouštění** úloh
- možná **predikce doby spuštění/čekání**
- **zaplňování „děr“** v rozvrhu vhodnými úlohami
- **vyšší vytížení** infrastruktury
- **optimalizace rozvrhu** vzhledem ke zvoleným kritériím (čekání, férovost, …)

Dílčí výsledek práce: simulátor plánování/běhu úloh

- usnadnění simulace budoucích plánovacích mechanismů

Rozvrhový plánovač II.

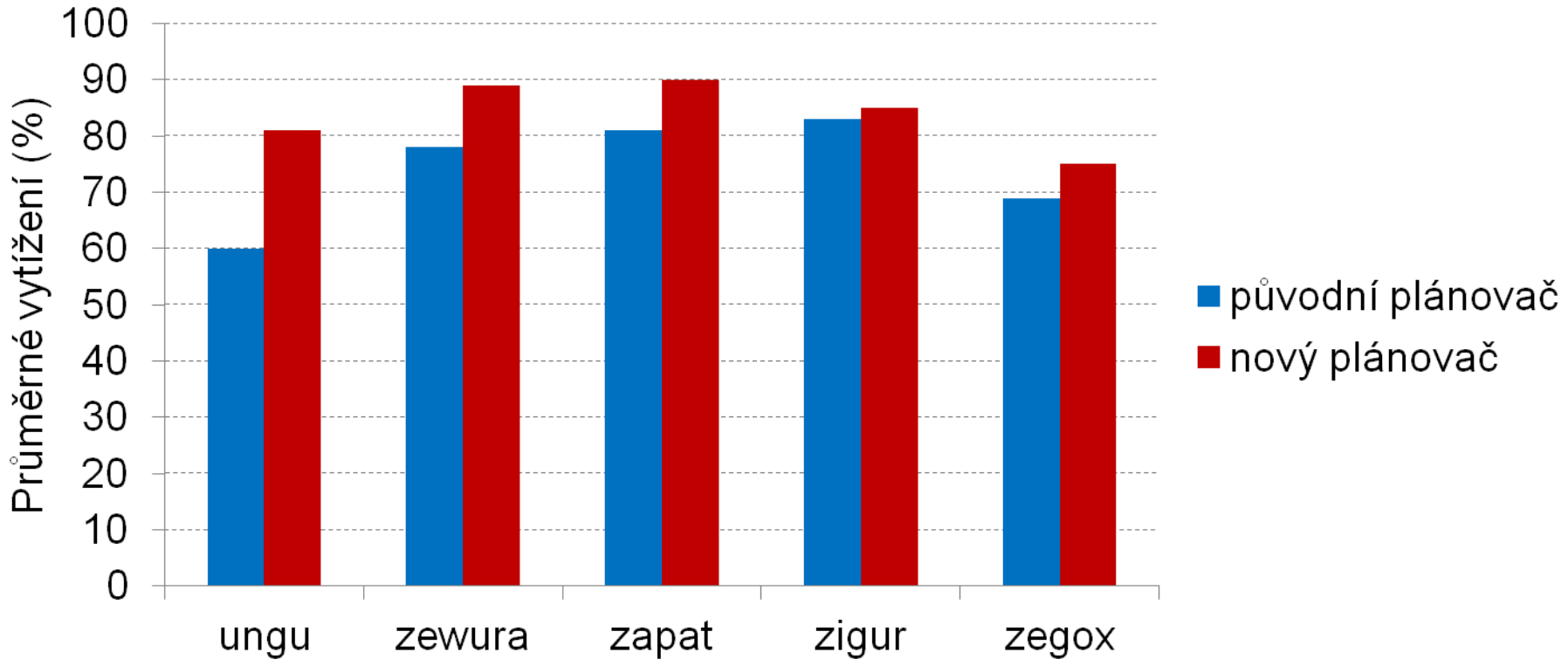
Frontový (vlevo) vs. Rozvrhový plánovač (vpravo)



Rozvrhový plánovač III.

Zlepšení vytížení strojů v CERIT-SC

(data za rok 2014)



Další výzkum

Férové plánování

- **cíl: zajištění rovnoměrného rozložení využití zdrojů v heterogenním prostředí výpočetního gridu**
- probíhající disertační práce

Výpočty na GPU kartách

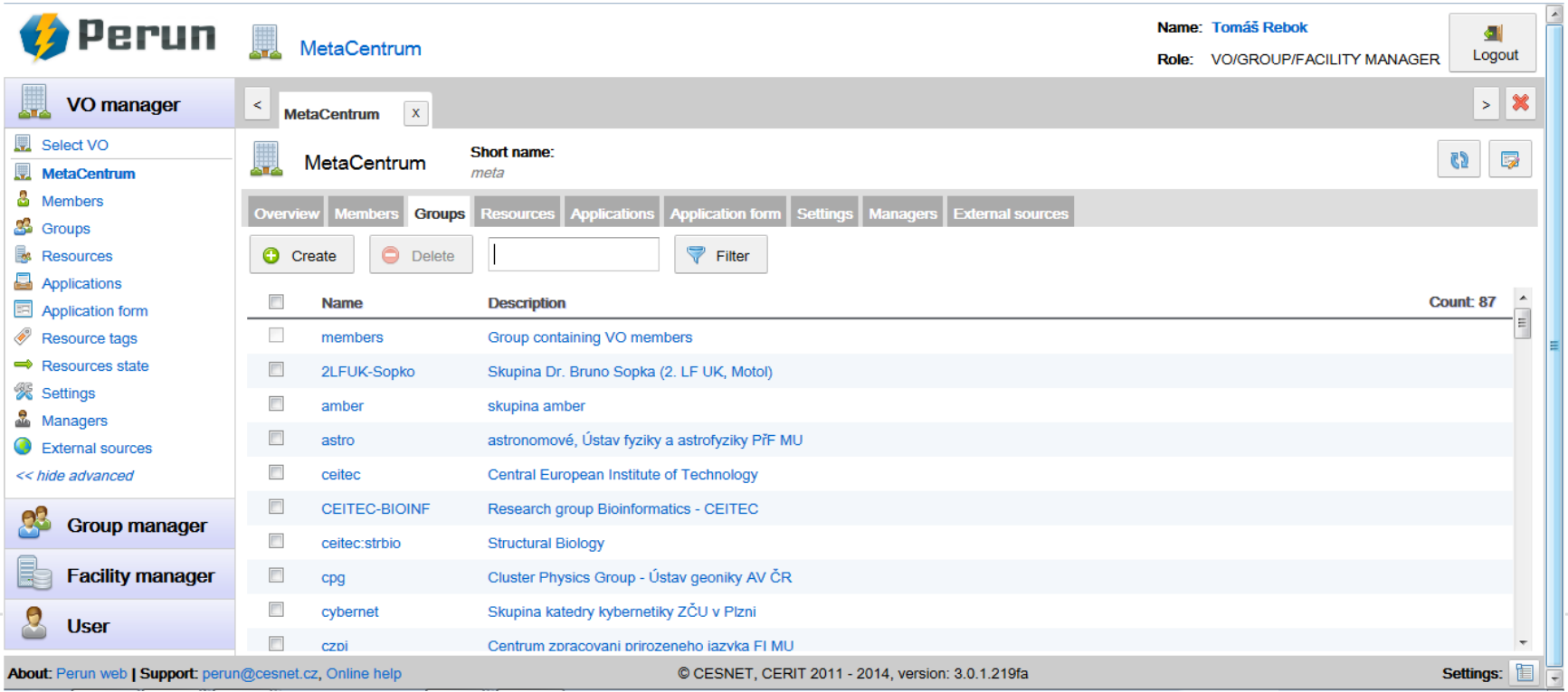
- uplatnění pro širokou škálu aplikací (vyšší aritmetický výkon a paměťová propustnost)
- navržena metoda a prototyp kompilátoru pro **automatickou fúzi výpočetních kernelů**

Perun

- systém pro **správu identit, skupin a přístupu na služby**
- integrovatelný do existujících prostředí, kde funguje jako **konsolidátor uživatelů a skupin**

Další výzkum – Perun

- **většina služeb české eInfrastruktury** je spravovaná systémem Perun
- systém je **úspěšně nasazován i v cizině**
  - Malaysia (Sifulan), Nigeria (NgREN), South Africa (SAGRID), Maroco, Italy (GARR), EGI - core service, …



Kolaborativní výzkum

Rekonstrukce stromů I.

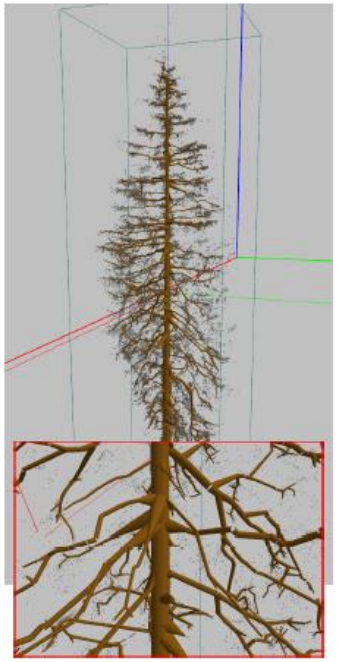
Rekonstrukce individuálních stromů z laserových skenů

- **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

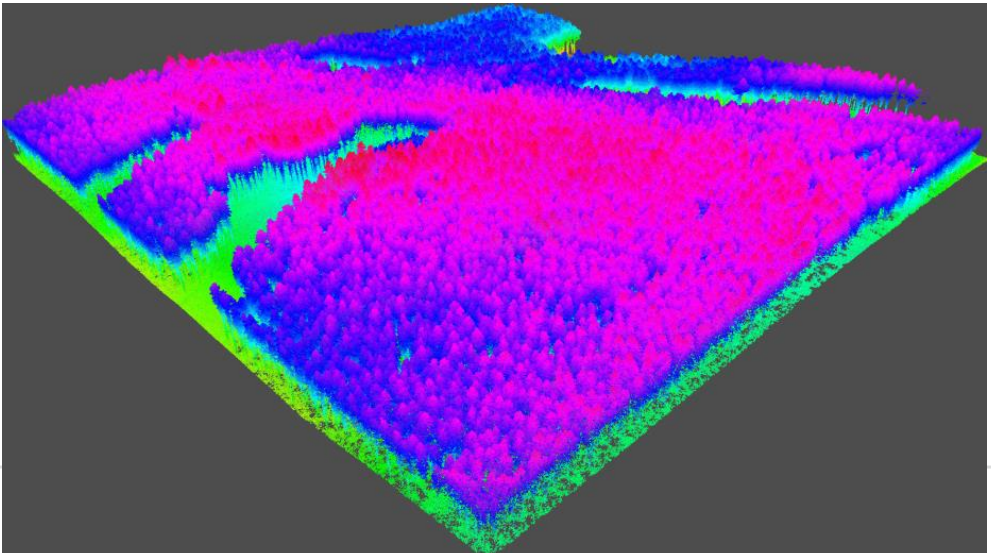
- **v rámci DP navržena *inovativní metoda* rekonstrukce 3D modelů smrkových stromů**
- **rekonstruované modely využity v návazném výzkumu**
  - **získávání statistických informací** o množství dřevité biomasy a o základní struktuře stromů
  - **parametrizované opatřování zelenou biomasou** (mladé větve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

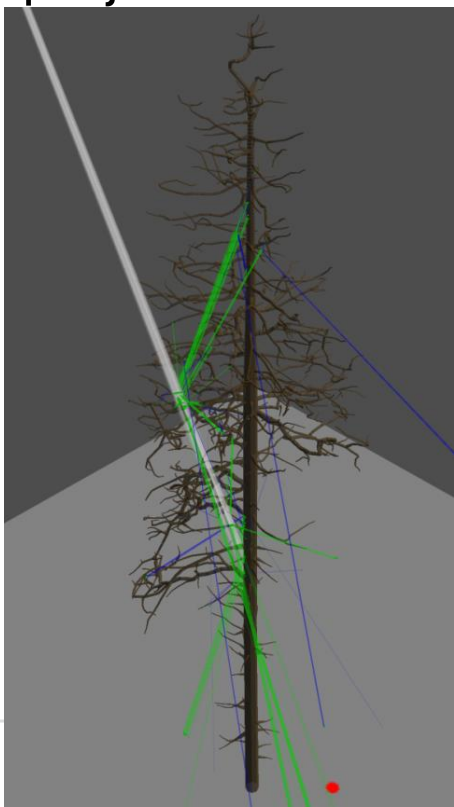


Rekonstrukce lesů I.

Rekonstrukce lesních porostů z full-wave LiDAR skenů

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





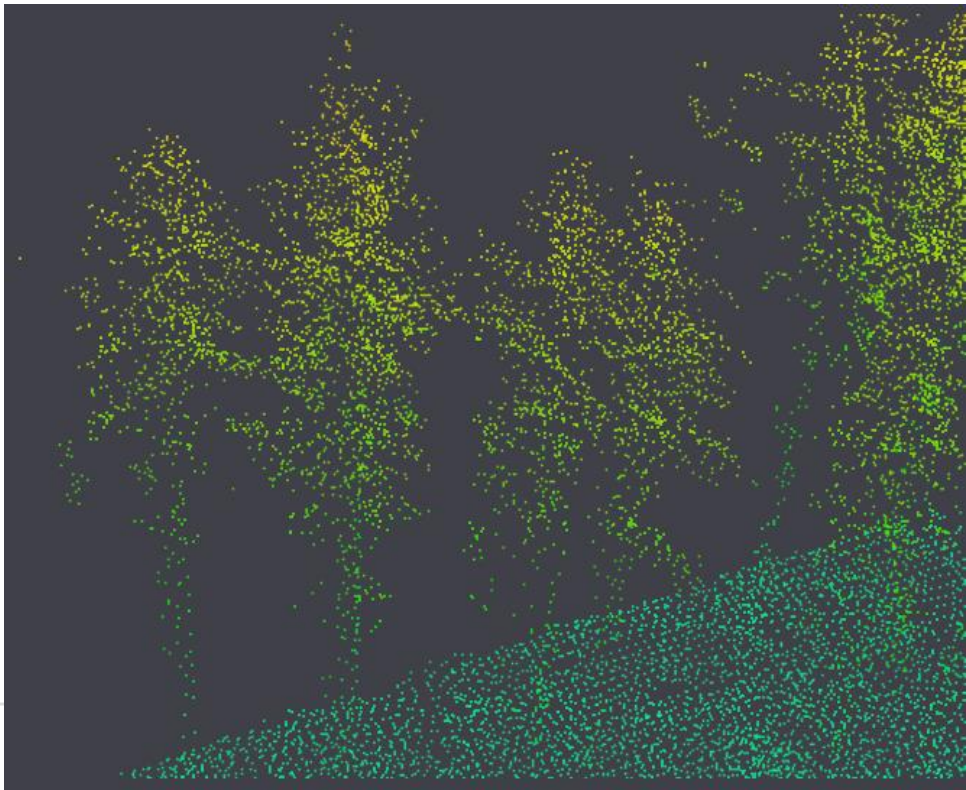
Rekonstrukce lesů II.

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**
- 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*

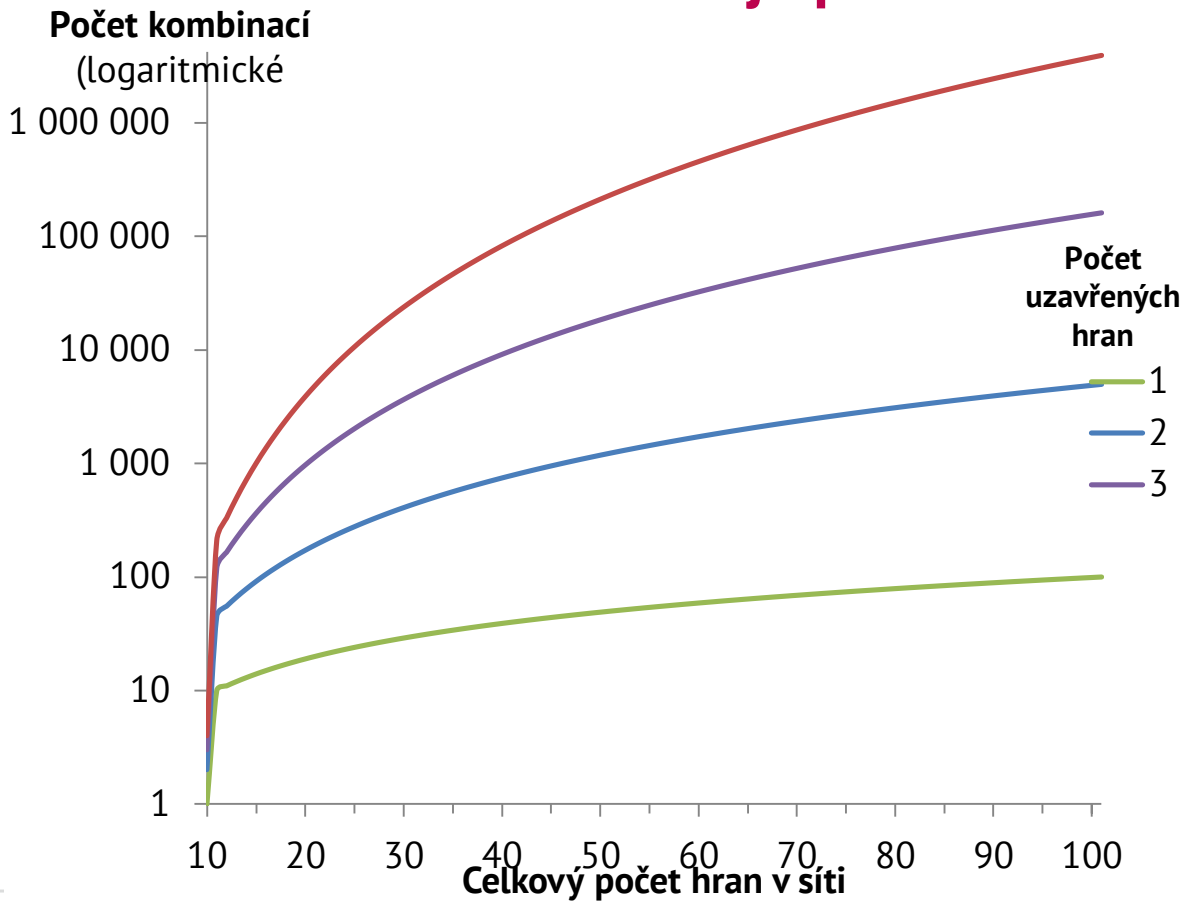
cíl projektu: nalezení metody pro identifikaci problémových uzavírek v silniční síti ČR (aktuálně Zlínského kraje)

- 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?



Síť 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 optima-lizováno** až na **cca 50% využití paměti**

Fotometrický archív astronomických snímků

- **partner:** *Ústav teoretické fyziky a astrofyziky PřF MU*
- **cíl projektu: vytvoření a provoz portálu pro získávání dat o světelnosti proměnných hvězd (projekt SuperWASP)**
  - databáze cca 18 miliónů hvězd

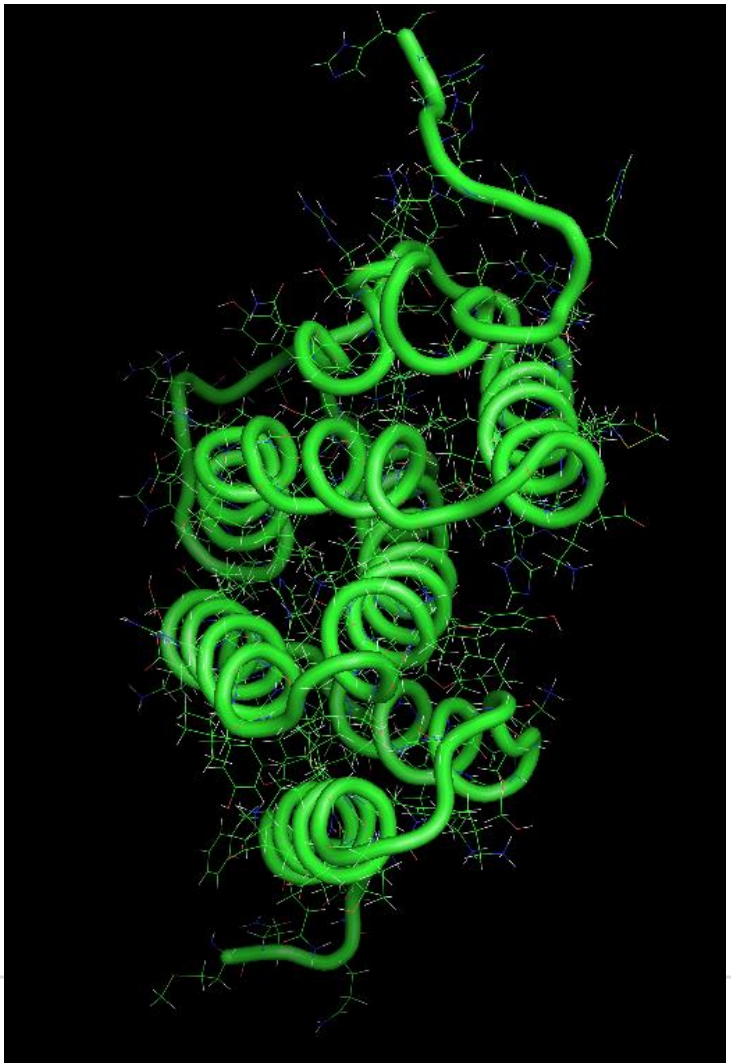
- **dosažené výsledky:**
  - **portál v produkčním režimu:** http://wasp.cerit-sc.cz
  - rozšířen o **vykreslení grafu světelné křivky** (DP práce)
  - provoz systému pro **detekci hvězd v hvězdokupě**: http://clusterix.cerit-sc.cz/
  - **archiv CCD snímků**: http://wasp.cerit-sc.cz/paw/

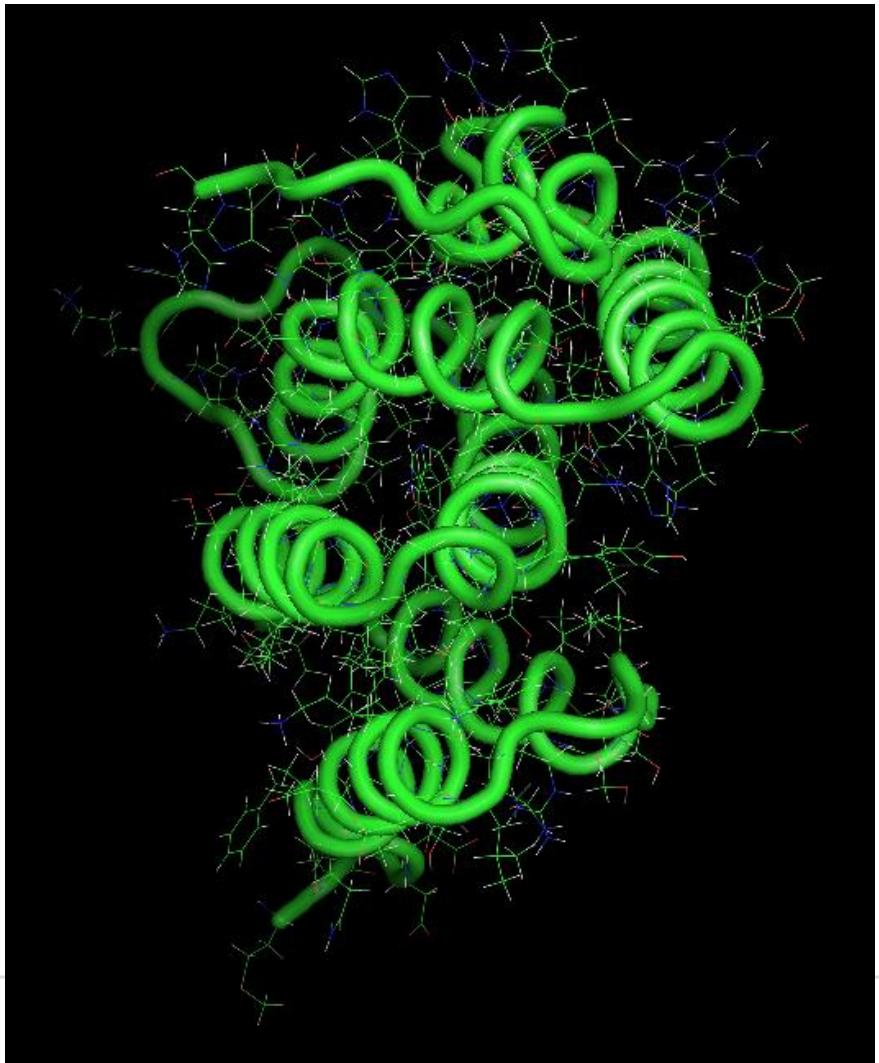
Výpočetní chemie a biochemie I.

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**
    - **prototypová implementace** ve stadiu vyhodnocení

Výpočetní chemie a biochemie II.



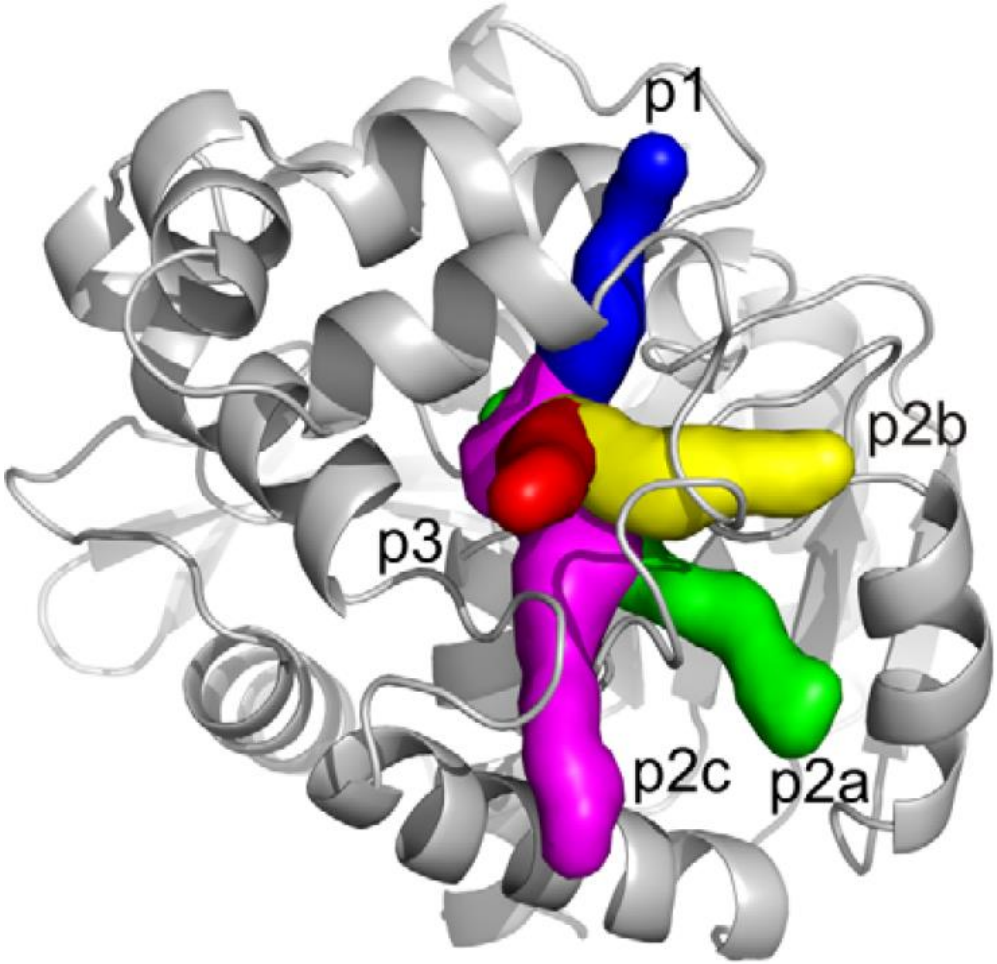


Výpočetní chemie a biochemie III.

Analýza transportních cest v proteinech

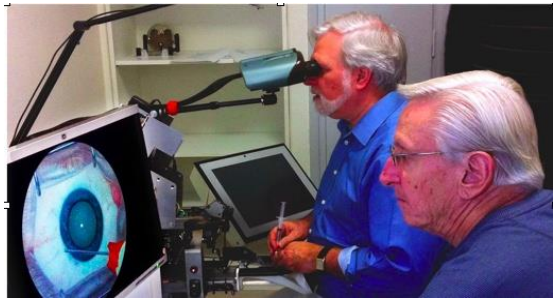
- **partner:** *Loschmidt Laboratories MU*
- **cíl projektu: analýza možností transportu molekul ligandu (např. léčivo) na aktivní místa proteinů**
  - tj. zajištění nejen kýženého účinku molekuly na protein, ale zejména ověření možností transportu této molekuly k aktivním místům proteinů
  - v současné 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
    - implementace ve stádiu prototypu, zatím bez plné automatizace

Výpočetní chemie a biochemie IV.

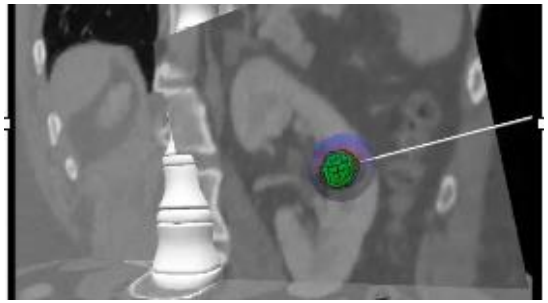


Modelování měkkých tkání v reálném čase I.

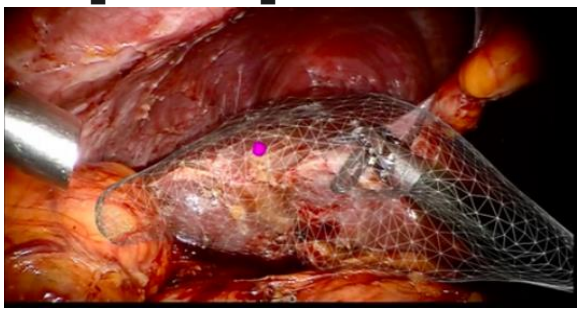
- **Využití biomechanických modelů vytvořených z pre-operativních dat pacientů (CT, MRI) pro aplikace v medicíně**
  - **reálný čas** [25Hz] nebo dokonce **hmatová (haptická) interakce [>500Hz]**



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

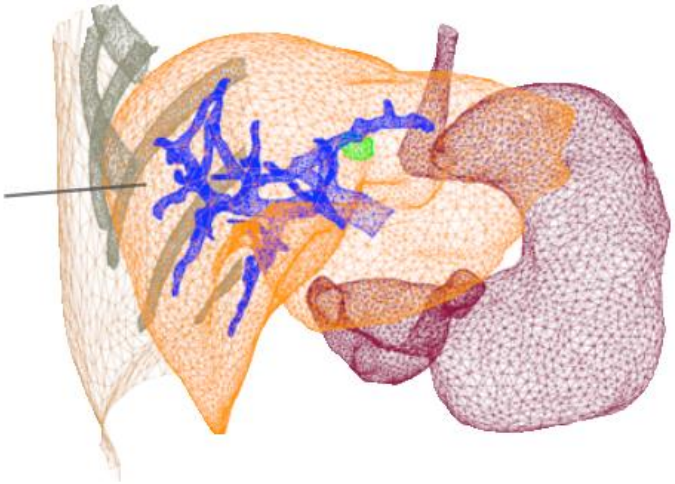
Modelování měkkých tkání v reálném čase II.

Nasazení v lékařské praxi

řešení reálných problému, 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 elektrofyziologie, heat-transfer

Validace a verifikace modelů

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

- **mezinárodní spolupráce** s instituty (IHU Strasbourg, INRIA France) a univerzitami (University of British Columbia, Koç University, Istanbul)
- **podán evropský H2020 projekt**

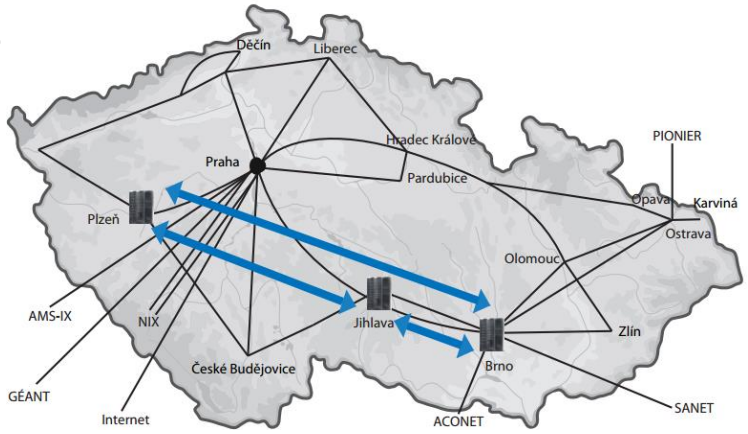
Další spolupráce …

- **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*
- **…**

Úložné služby

Budovaná infrastruktura datových úložišť

- trojice úložišť: **Plzeň, Jihlava, Brno**
  - fyzická kapacita **cca 22 PB**
  - **duální připojení do páteřní sítě**



- Geografické oddělení
  - *Plzeň:* cca 500 TB online disků + 3,5 PB vypínatelné disky + 4,80 PB pásek
  - *Jihlava:* cca 800 TB online disků + 2,5 PB vypínatelné disky + 3,7 PB pásek
  - *Brno:* cca 500 TB online disků + 2,1 PB vypínatelné disky + 3,5 PB pásek

http://du.cesnet.cz

Možnosti využití datových úložišť I.

- zálohy
  - uživatelé mají primární data u sebe
  - na úložiště odkládají zálohu pro případ havárie
- archivace
  - uživatelé na úložiště odkládají cenná primární data
  - uživatelé nemají vlastní prostředky pro dlouhodobé uchování takových dat
- sdílení dat
  - distribuovaný tým potřebuje společně pracovat nad většími objemy dat, případně je zveřejňovat
- „něco jiného“
  - v rámci možností lze podpořit i jiné scénáře

Možnosti využití datových úložišť II.

- a naopak: **na co se vzdálené úložiště příliš nehodí**
  - interaktivní práce zejména s větším množstvím malých souborů
  - ukládání dat s potřebou přístupu v reálném čase
    - prioritou je spolehlivost uložení, dostupnost méně
    - „pokud při nedostupnosti dat zemře pacient, pak sem taková data nepatří“

Infrastruktura DÚ „pod pokličkou“ I.

Aneb *„Co je potřeba vědět o specifících těchto úložišť?“*

Úložiště jsou hierarchická

- vrstvy médií různé kapacity a rychlosti
  - rychlé disky/pomalejší disky/MAID/pásky
  - drahý provoz → levnější provoz
    - optimalizace poměru kapacity, přístupové doby, pořizovací ceny a nákladů na údržbu
- a automatizovaný systém pro přesuny dat mezi nimi
  - déle nepoužívaná data odkládána do pomalejších vrstev
  - pro uživatele transparentní, resp. téměř transparentní
    - přístup k dlouho nepoužitému souboru trvá déle

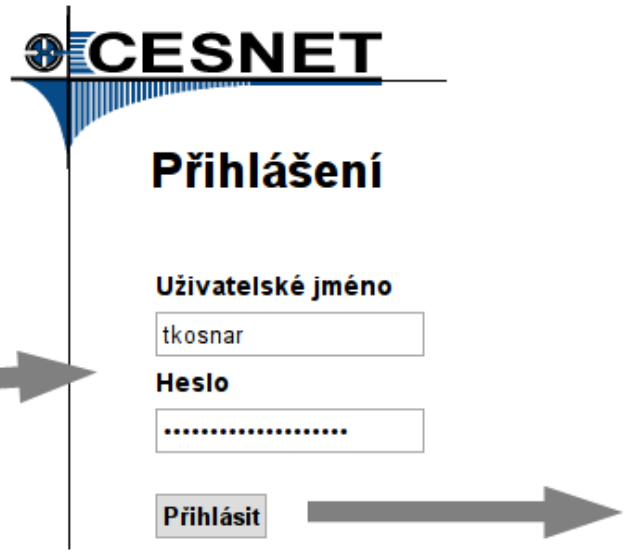
DÚ – služby dostupné uživatelům

- prostředí pro **zálohování, archivaci,** a **sdílení dat**
- **úložiště pro speciální aplikace**

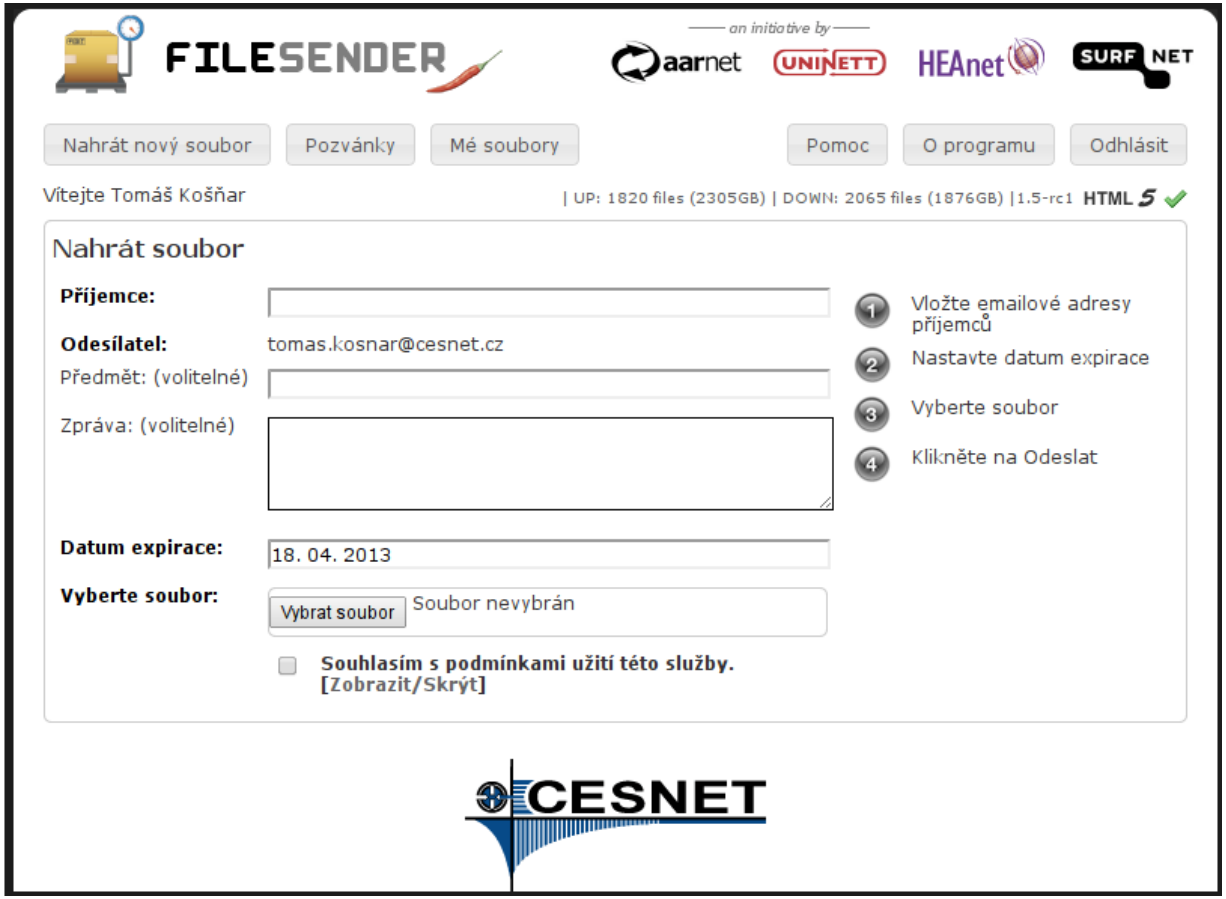
- **úschovna dat – *FileSender***
  - webová služba pro jednorázový přenos velkých souborů
    - velkých: aktuálně 500 GB
    - http://filesender.cesnet.cz
  - alespoň jedna strana komunikace musí být oprávněný uživatel infrastruktury
    - autentizace federací eduID.cz
  - oprávněný uživatel **může nahrát soubor a poslat příjemci oznámení**
  - pokud oprávněný uživatel potřebuje **získat soubor od externího uživatele, pošle mu pozvánku**

FileSender – ukázka I.

FileSender – ukázka II.



FileSender – ukázka III.

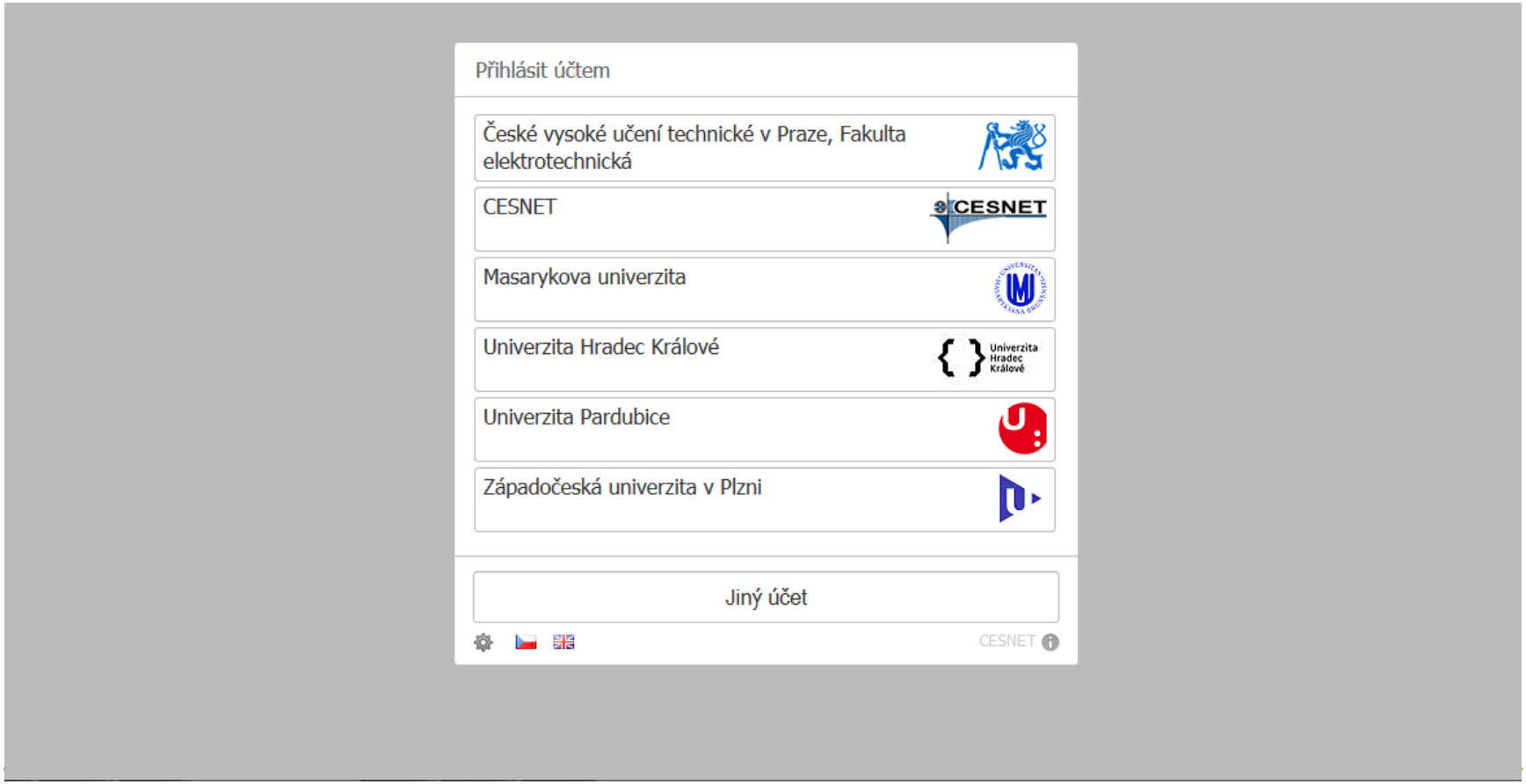


OwnCloud

- **cloudové úložiště „á la Dropbox“**
  - s prostorem 100 GB / uživatel
  - přístup přes webové rozhraní
    - https://owncloud.cesnet.cz/
  - klienti pro Windows, Linux, OS X
  - klienti pro chytré telefony a tablety
  - nastavitelné sdílení dat mezi skupinou nebo na základě odkazu
  - každodenní zálohování dat
  - verzování dokumentů
  - platforma pro sdílení kalendářů a kontaktů

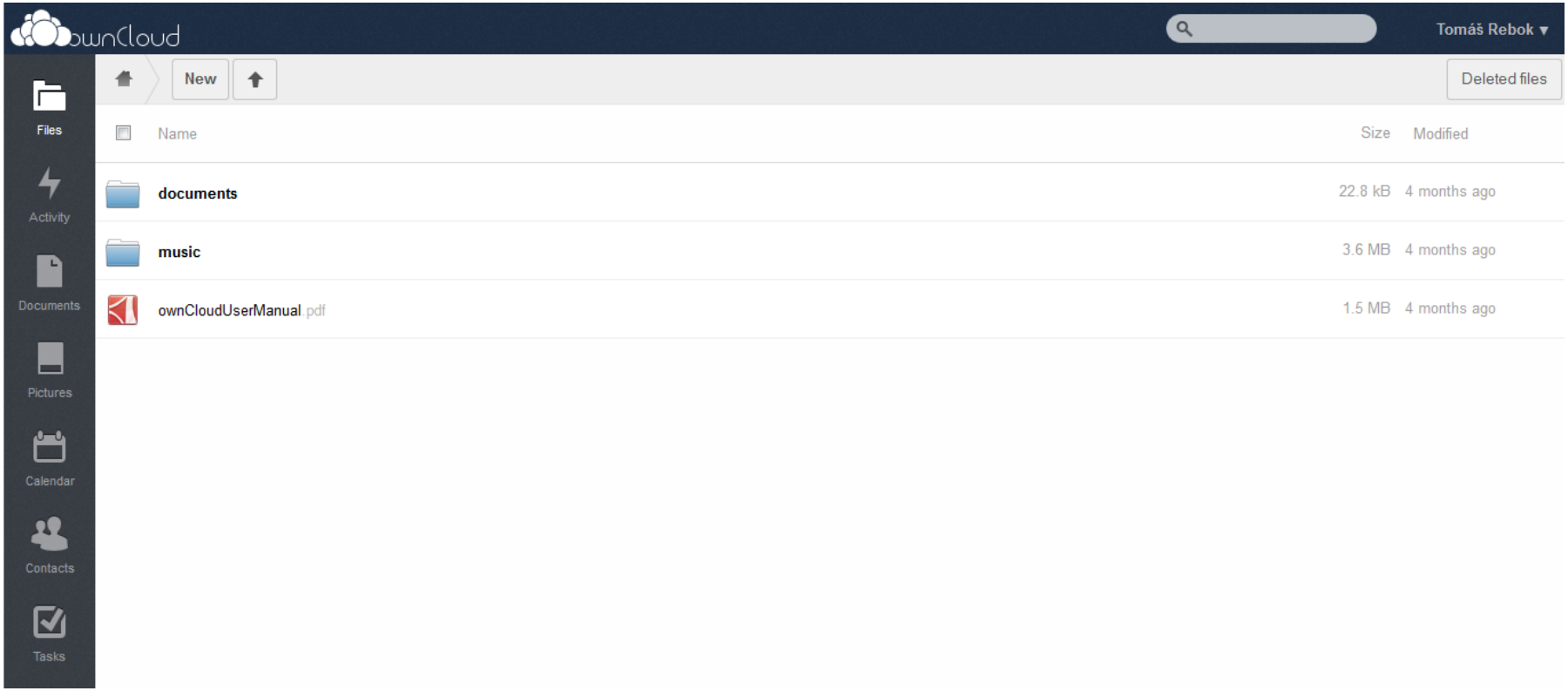
OwnCloud – ukázka I.

OwnCloud – ukázka II.



OwnCloud – ukázka III.

OwnCloud – ukázka IV.



Služby pro podporu vzdálené spolupráce

Prostředí pro podporu spolupráce

Profil služeb:

- Podpora interaktivní spolupráce v reálném čase
  - videokonference
  - webkonference
  - speciální přenosy
  - IP telefonie
- Podpora pasivní účasti na akcích
  - streaming a videoarchív
- Spolupráce a konzultace
- Výzkum a vývoj

http://vidcon.cesnet.cz

Prostředí pro spolupráci I.

Videokonference:

- infrastruktura pro přenos **kvalitního obousměrného obrazu** (max. HD), **širokopásmového zvuku** a **pasivních podkladů** (jednosměrné prezentace)
  - *virtuální místnosti pro vícebodová spojení (MCUs)*
  - přístup prostřednictvím specializovaných HW/SW jednotek (H.323, SIP)
    - koncové stanice si pořizuje instituce
  - pomůžeme s výběrem HW/SW klientů
    - infrastruktura je heterogenní
    - cílem je kompatibilita
  - nabízíme sdílené licence pro SW klienty

Prostředí pro spolupráci II.

Webkonference:

- infrastruktura pro přenos **obousměrného obrazu** (max. SD), **zvuku** a **aktivních (bohatých) podkladů**
  - sdílení souborů, plochy a aplikací
  - tabule
  - poznámky
  - hlasování
  - chat
- infrastruktura – **Adobe Connect:**
  - místnosti s persistentním obsahem
  - založeno na Adobe Flash => **klienti běžné internetové prohlížeče** (bez nutnosti instalace)
  - personální vybavení shodné se SW videokonferencemi

Prostředí pro spolupráci III.

Společné služby (videokonference + webkonference)**:**

- systém pro rezervaci virtuálních místností
  - http://meetings.cesnet.cz
  - lze vytvářet **jednorázové** i **permanentní místnosti**
- napojení na nahrávání a streaming

Prostředí pro spolupráci IV. – videokonference

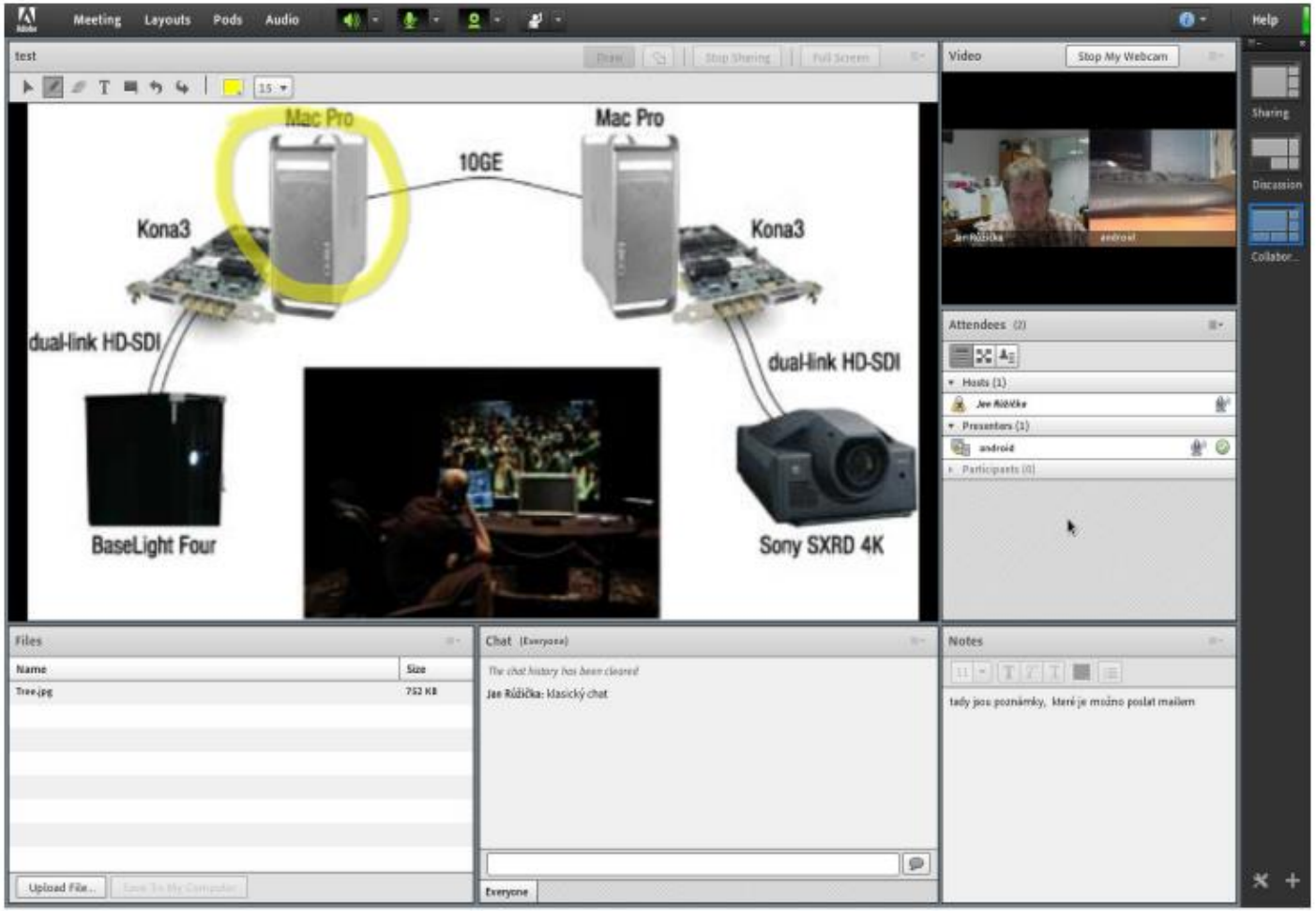
Four Sites Quad Split

esentation Large with Four Sites video POP images

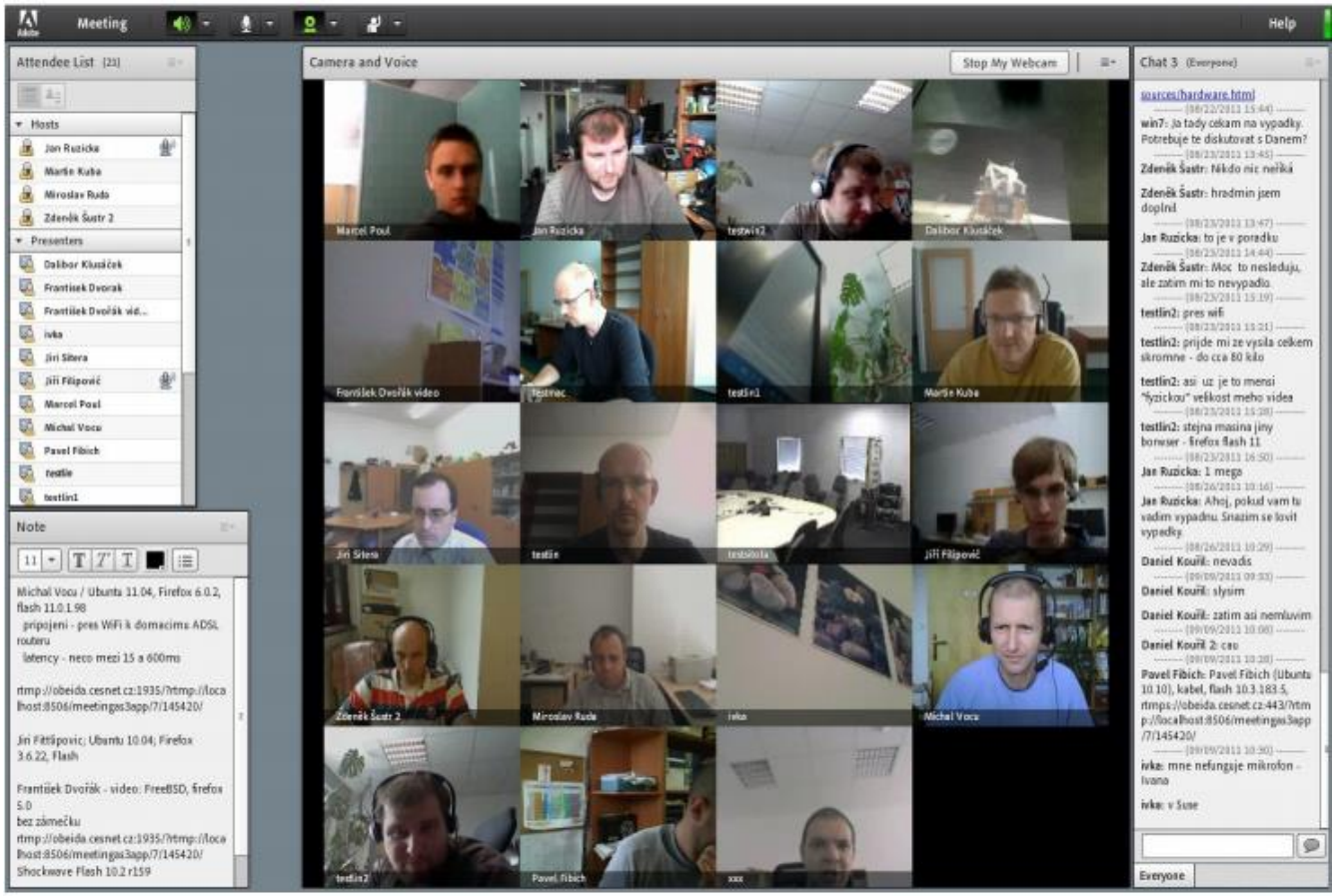
Full Screen Site with Multiple PIPs

S počtem účastníků NErostou nároky na stanice

Prostředí pro spolupráci V. – webkonference



Prostředí pro spolupráci VI. – webkonference

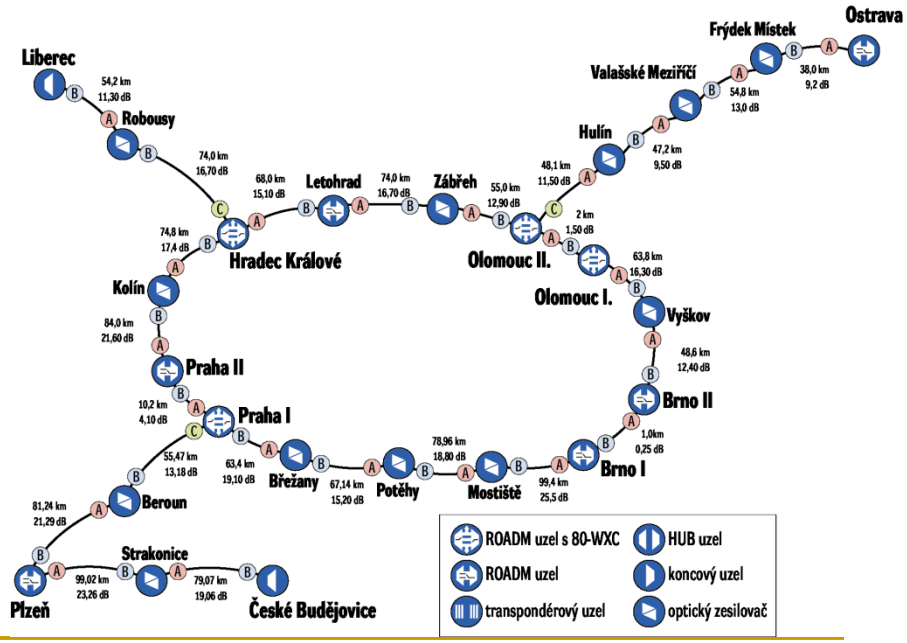


S počtem účastníků s videem rostou nároky na stanice

Další podpůrné služby

Komunikační infrastruktura

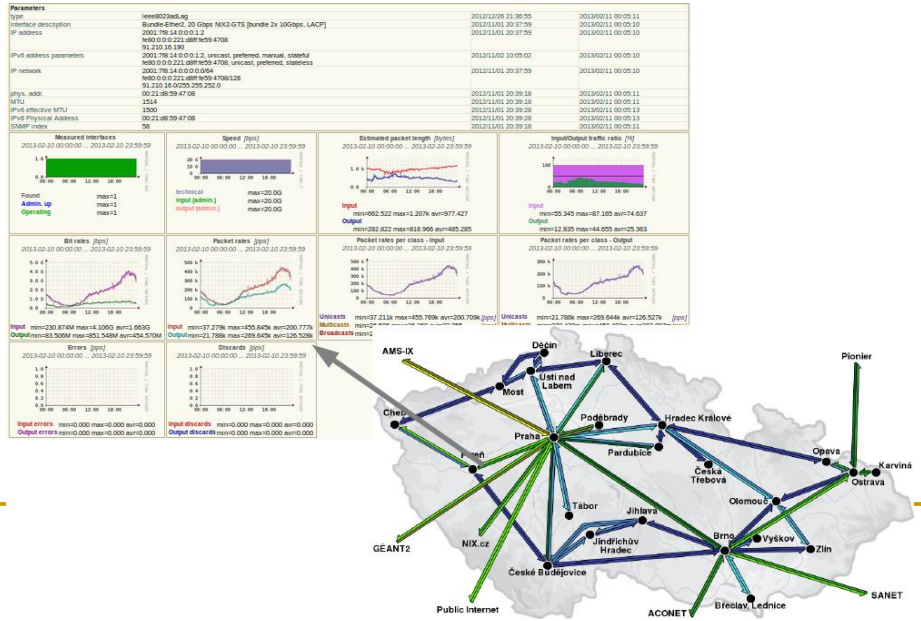
- Základní komponenta e-infrastruktury: **vysokorychlostní počítačová síť CESNET2**
  - **spolehlivost sítě** zajištěna duálním připojením uzlů
  - **výkon sítě:**
    - jádro sítě 100 Gbps
    - uzly do jádra připojeny 40-100 Gbps
  - přímé propojení (na fyzické vrstvě do **pan-evropské sítě pro výzkum a vzdělávání GÉANT**



Monitoring komunikační infrastruktury

Sledování provozu sítě

- sběr, zpracování, zpřístupnění, vizualizace informací o infrastruktuře a o IP provozu
- automatická detekce a notifikace jevů, anomálií apod.
- monitorování kvalitativních charakteristik sítě



Bezpečnost

Řešení bezpečnostních incidentů

- platforma (technická, organizační) pro **řešení a asistenci při řešení bezpečnostních incidentů** v e-infrastruktuře CESNET a administrativní doméně komunity
  - cesnet.cz, cesnet2.cz, ces.net, liberouter.org, liberouter.net, ipv6.cz, acad.cz, eduroam.cz a v IP adresách interní infrastruktury sítě CESNET2
- bezpečnostní tým CESNET-CERTS

- *další služby:*
  - **školení pro (nejen) studenty prvních ročníků**
  - další osvětová činnost
    - školení, semináře, workshopy, …

CESNET CERTS

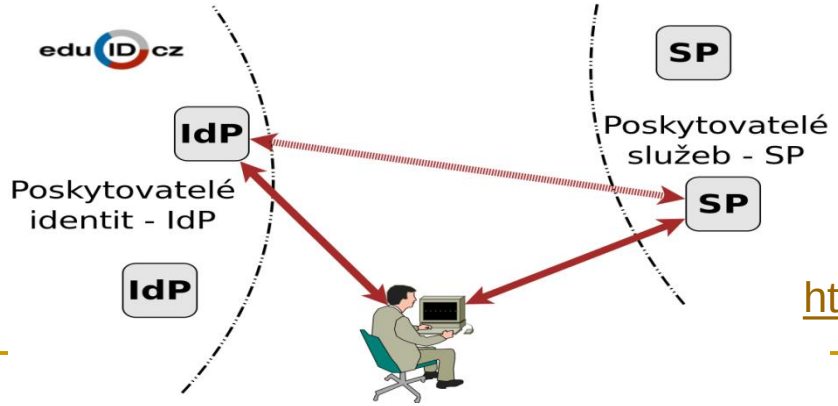
http://csirt.cesnet.cz

Federalizovaná správa identit

Česká akademická federace identit eduID.cz

- autentizační infrastruktura pro vzájemné využívání identit uživatelů při řízení přístupu k síťovým službám
  - uživatel využívá **pouze jedno heslo pro přístup k více aplikacím**
  - **správci aplikací neudržují autentizační data uživatelů**, ani neprovádí autentizaci
  - autentizace uživatele probíhá **vždy v kontextu domovské organizace**, **citlivé autentizační údaje** uživatele **neopouští domovskou síť**

- **Hostel IdP** pro uživatele z institucí nezapojených do eduID.cz
  - např. AV ČR



http://www.eduid.cz

Certifikáty pro uživatele a servery (PKI)

Certifikační autorita CESNET CA

- vydávání certifikátů od TERENA (*Trans-European Research and Education Networking Association*)
- *služby CESNET CA:*
  - vydávání osobních certifikátů
  - vydávání certifikátů pro servery a služby
  - certifikace registračních úřadů
  - certifikace certifikačních úřadů

http://pki.cesnet.cz

Podpora IP mobility a roamingu

Eduroam.cz

- snaha umožnit uživatelům transparentní používání sítí (českých i zahraničních) zapojených do projektu Eduroam
- *služby CESNET Eduroam:*
  - koordinace a propagace souvisejících aktivit
  - začleňování nových organizací
  - provoz infrastruktury RADIUS serverů

eduroam.cz

http://www.eduroam.cz

Další služby VI CESNET

- Konzultace a školení
  - bezpečnostní školení
  - technické konzultace
  - Cisco akademie
- Pokročilé síťové služby
  - fotonické a lambda služby
  - časové služby v síti
- Prostředí pro vývoj a testování aplikací/protokolů (PlanetLab)
- Transfer technologií
  - návrh optických sítí a systémů „na míru“
  - poskytování licencí k vyvinutým zařízením
- Interní služby
  - systém správy účtů uživatelů infrastruktur VI CESNET a CERIT-SC (Perun)
- …

Více viz
http://www.cesnet.cz/sluzby

Závěr

- **VI CESNET:**
  - ***výpočetní služby* (MetaCentrum NGI & MetaVO)**
  - *úložné služby* (archivace, zálohování, výměna dat, …)
  - *služby pro podporu vzdálené spolupráce* (videokonference, webkonference, streaming, …)
  - další podpůrné služby (…)
- **Centrum CERIT-SC:**
  - *výpočetní služby* (produkční i flexibilní infrastruktura)
  - *služby pro podporu kolaborativního výzkumu*
  - správa identit uživatelů jednotná s VI CESNET

- *Hlavní sdělení prezentace:* „Pokud v poskytovaných službách nenalézáte řešení Vašich konkrétních potřeb, **ozvěte se** – společnými silami se pokusíme řešení nalézt…“

MetaCentrum
VIRTUAL ORGANIZATION

ÚVT

cerit
scientific cloud

Hands-on seminar

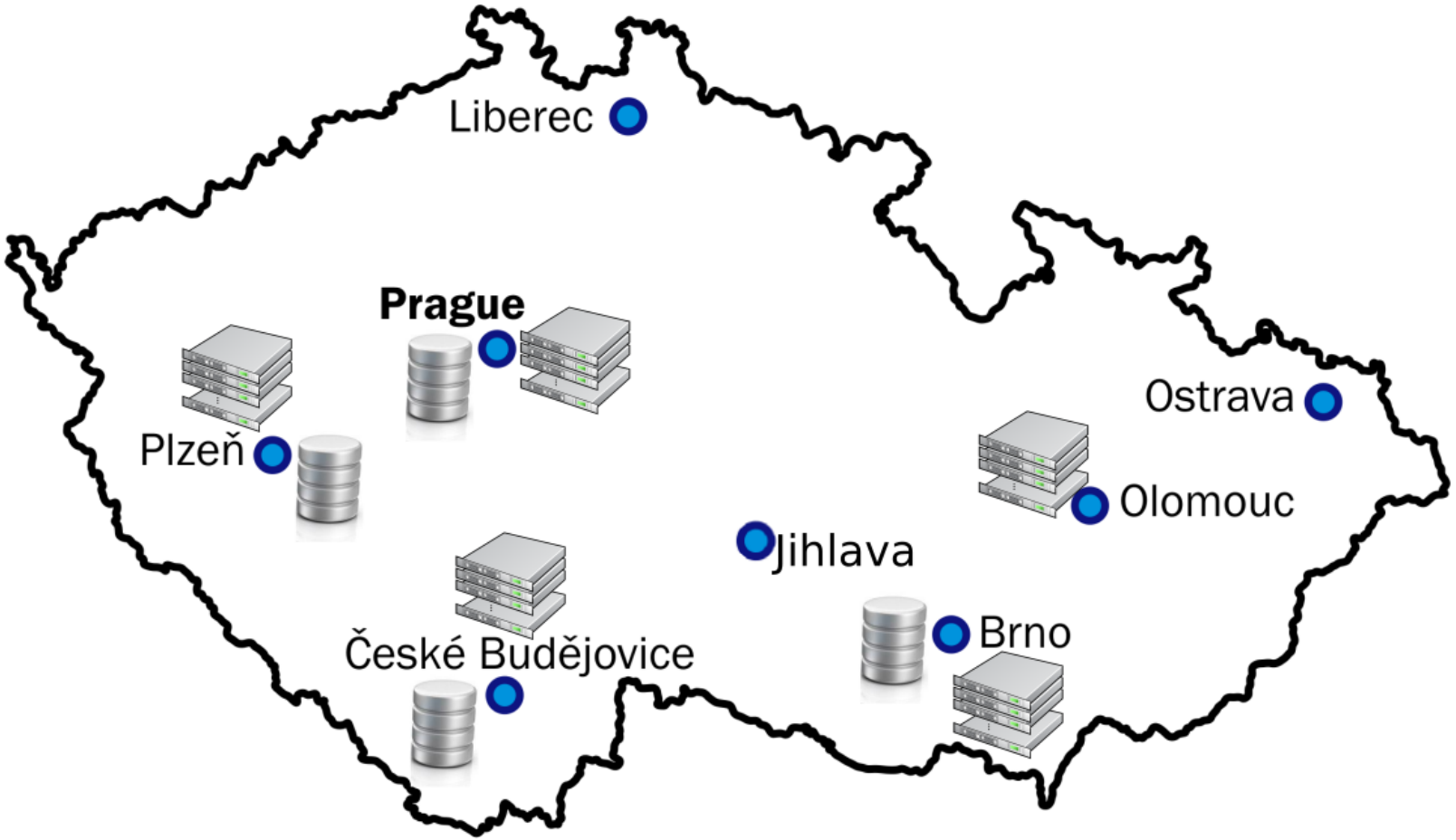
Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

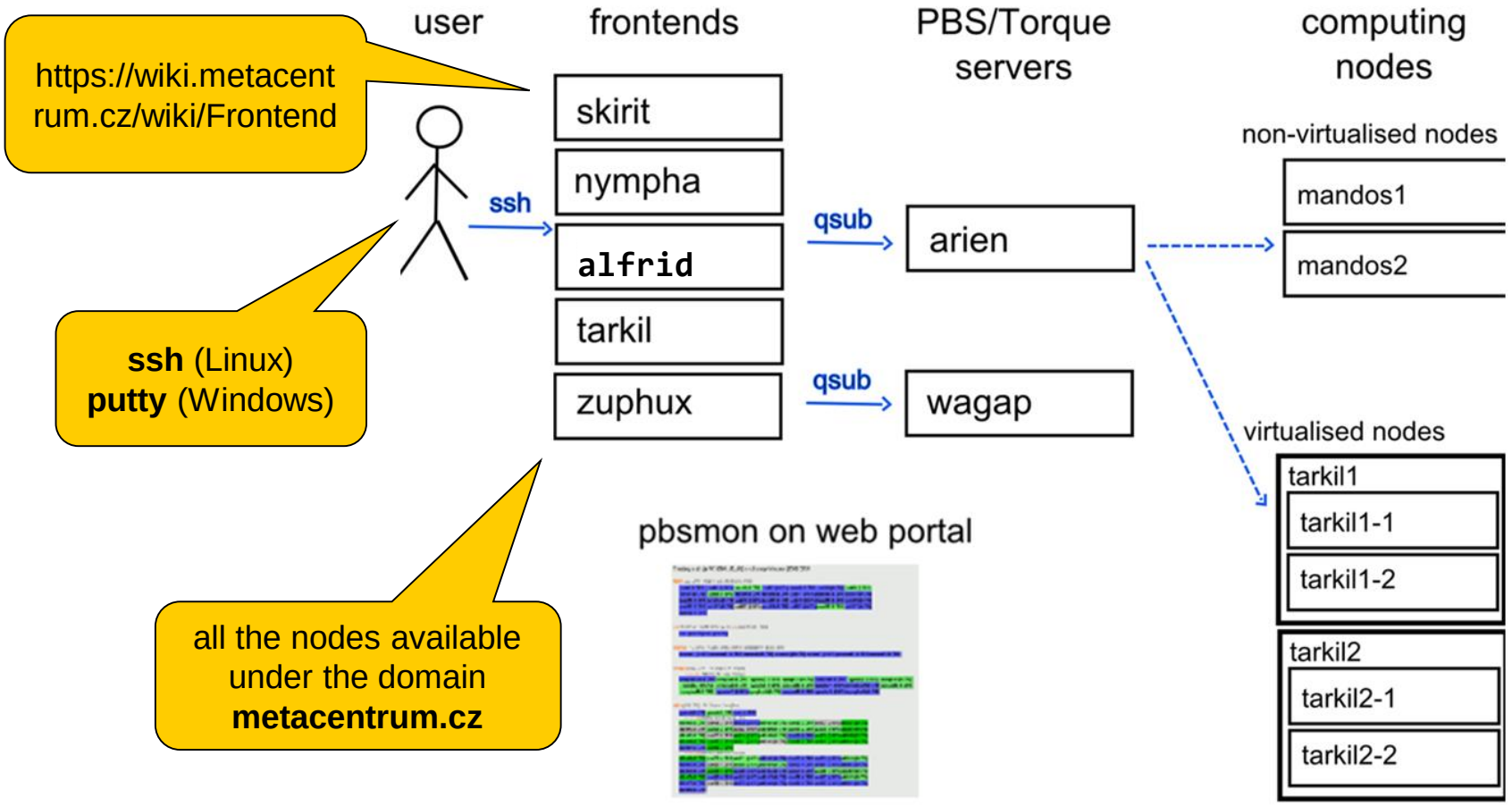
- **Grid infrastructure overview**
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

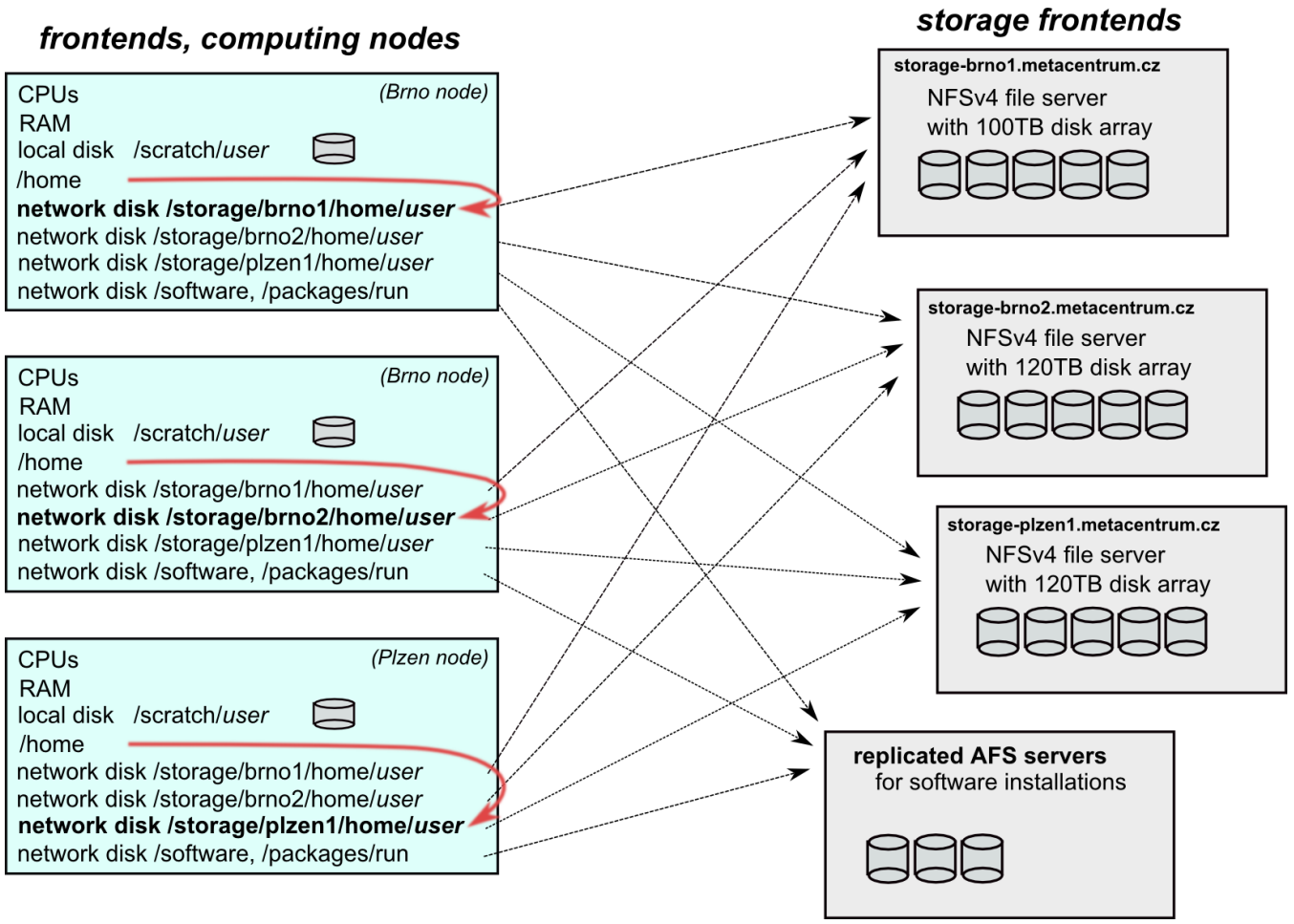
Grid infrastructure overview I.



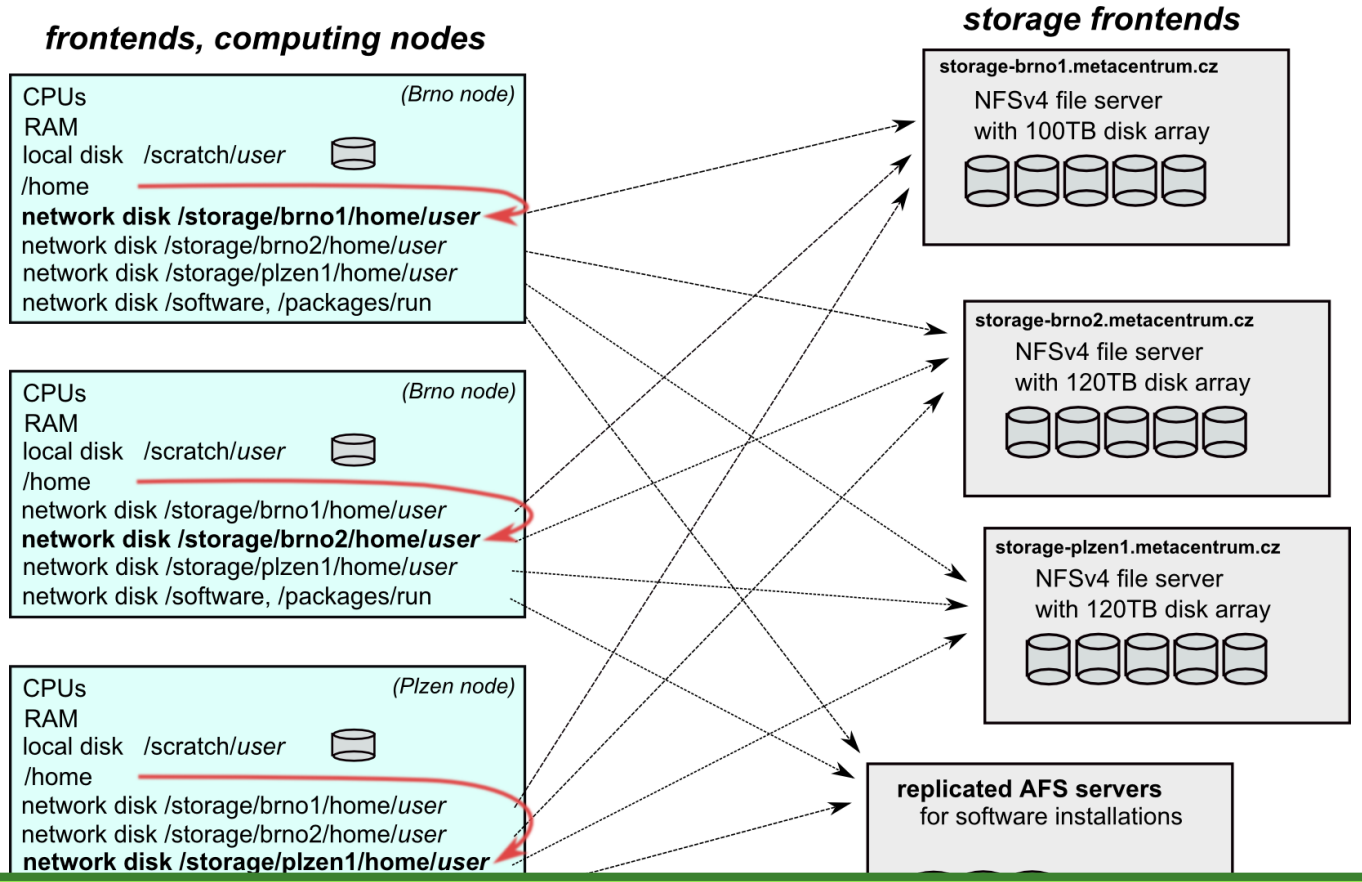
Grid infrastructure overview II.



Grid infrastructure overview III.



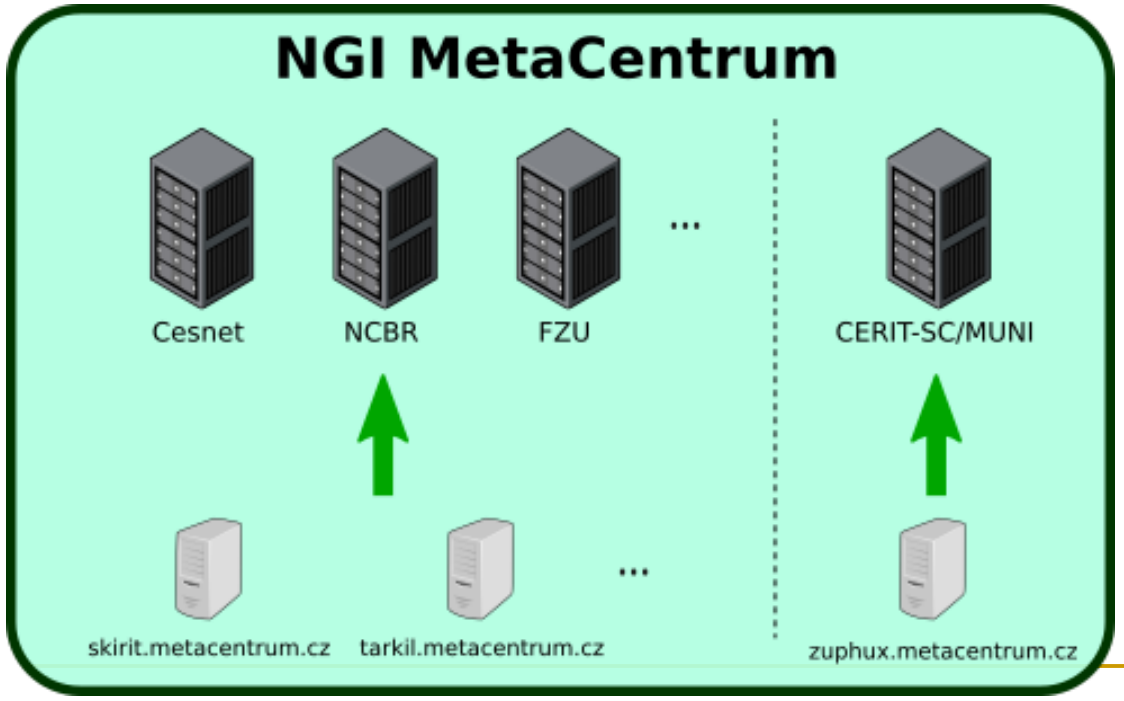
Grid infrastructure overview III.



- the /storage/XXX/home/$USER **is default login directory**

Grid infrastructure overview IV.

- **MetaCentrum and CERIT-SC**
  - MetaCentrum provides own HW resources (CESNET) and integrates resources of external providers
    - CERIT-SC/MUNI is one of them
    - others are CEITEC/NCBR, FZU, ČVUT, JČU, ZČU, UPOL, MU, etc.



+ shared storages

and shared SW apps

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- **How to … specify requested resources**
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

How to … specify requested resources I.

- before running a job, one needs to have an idea **what resources** the job requires
  - and how many of them
- means for example:
  - number of **nodes**
  - number of **cores per node**
  - an **upper estimation** of job's **runtime**
  - amount of **free memory**
  - amount of **scratch space** for temporal data
  - number of requested **software licenses**
  - etc.
- the resource requirements are then **provided to** the **qsub utility** (when submitting a job)

- **details about resources' specification:** https://wiki.metacentrum.cz/wiki/About_scheduling_system

How to … specify requested resources I.

- before running a job, one needs to have an idea **what resources** the job requires
  - and how many of them
- means for example:
  - number of **nodes**
  - number of **cores per node**

Current improvement:

New scheduling system – PBS Professional:

- controls the whole MetaCentrum infrastructure (and **part of CERIT-SC**)
- see details at https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Prostředí_PBS_Professional

- **details about resources' specification:** https://wiki.metacentrum.cz/wiki/About_scheduling_system

How to … specify requested resources II.

Graphical way:

- *qsub assembler:* http://metavo.metacentrum.cz/cs/state/personal

- allows to:
  - graphically specify the requested resources
  - check, whether such resources are available
  - generate command line options for qsub
  - check the usage of MetaVO resources

Textual way:

- **more powerful** and (once being experienced user) **more convenient**
- see the following slides/examples →

How to … use PBS Professional

- **a novel scheduling system used in MetaCentrum NGI**
  - see advanced information at https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Prostředí_PBS_Professional

New term – CHUNK:

- *chunk* = further indivisible set of resources allocated to job on a physical node
- contains *resources*, which could be asked from the infrastructure nodes

How to … specify requested resources I.

Chunk(s) specification:

- *general format:* `-l select=...`

Examples:

- 2 nodes:
  - `-l select=2`
- 5 nodes:
  - `-l select=5`

- by default, allocates just a single core in each chunk
  - → should be used together with **number of CPUs (NCPUs)** specification
- if "`-l select=...`" is not provided, just a single chunk with a single CPU/core is allocated

How to … specify requested resources II.

Number of CPUs (NCPUs) specification (1 chunk):

- *general format:* `-l select=...:ncpus=...`

- 1 chunk with 4 cores:
  - `-l select=1:ncpus=4`
- 5 chunks, each of them with 2 cores:
  - `-l select=5:ncpus=2`

(Advanced chunks specification:)

- *general format:* `-l select=[chunk_1][+chunk_2]...[+chunk_n]`

- 1 chunk with 4 cores and 2 chunks with 3 cores and 10 chunks with 1 core:
  - `-l select=1:ncpus=4+2:ncpus=3+10:ncpus=1`

How to … specify requested resources III.

Other useful nodespec features:

- nodes just from a **single (specified) cluster** (suitable e.g. for MPI jobs):
  - *general format:* `-l select=…:cl_<cluster_name>=true`
  - e.g., `-l select=3:ncpus=1:cl_doom=true`
- nodes with a **(specified) computing power** (based on SPEC benchmark):
  - *(to be announced)*
- nodes located in a **specific location** (suitable when accessing storage in the location)
  - *general format:* `-l select=…:<brno|plzen|...>=true`
  - e.g., `-l select=1:ncpus=4:brno=true`
- **exclusive node(s) assignment**:
  - *general format:* `-l select=… -l place=excl`
  - e.g., `-l select=1 -l place=excl`
- **negative** specification:
  - *general format:* `-l select=…:<feature>=false`
  - e.g., `-l select=1:ncpus=4:brno=false`
- …

A list of nodes' features can be found here: http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/props

„Kouzla“ s chunky

- **Příklady umístění chunků** `[arrangement]`

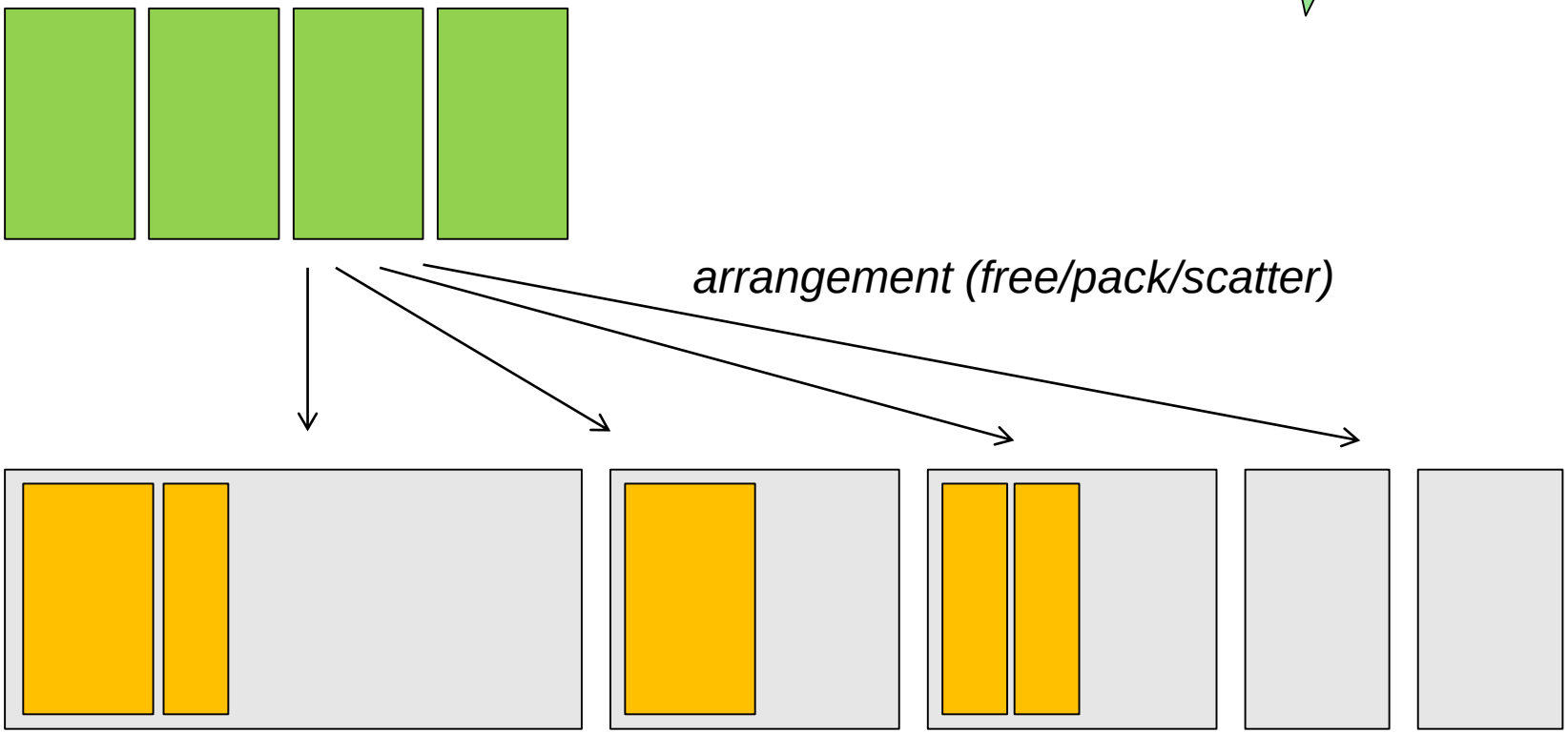
  `-l place=free`: chunky se mohou rozmísťovat libovolně jak to nejlépe plánovači aktuálně vyhovuje (defaultní chování)

  `-l place=pack`: všechny chunky umístit na stejný host (musí být dost velký)

  `-l place=scatter`: každý chunk umístit na svůj vlastní host (chování jako v Torque)

Příklady s plánováním

- **Plánování s chunky**
  - free vs. pack vs. scatter

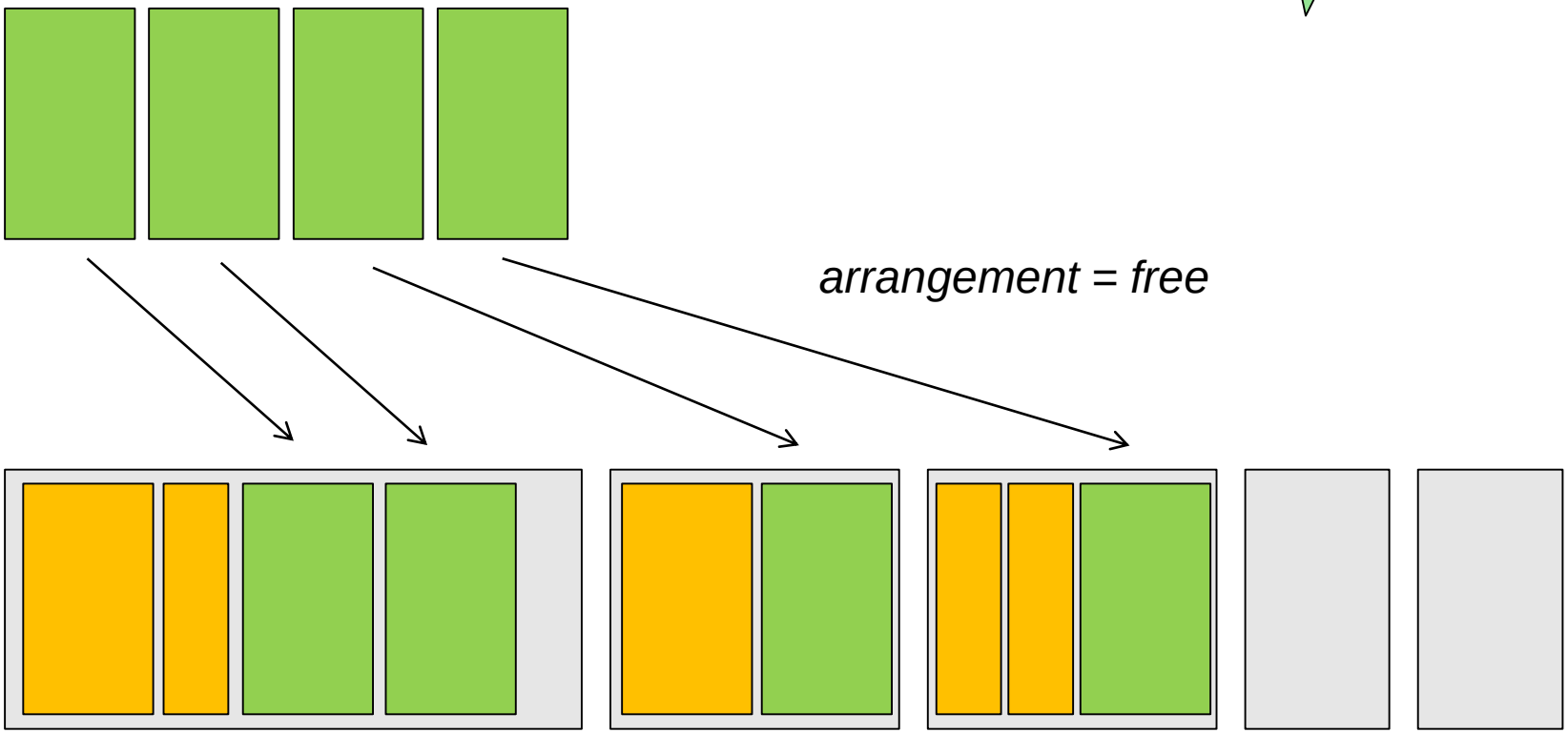


Příklady s plánováním

PBSPRO

Plánování s chunky

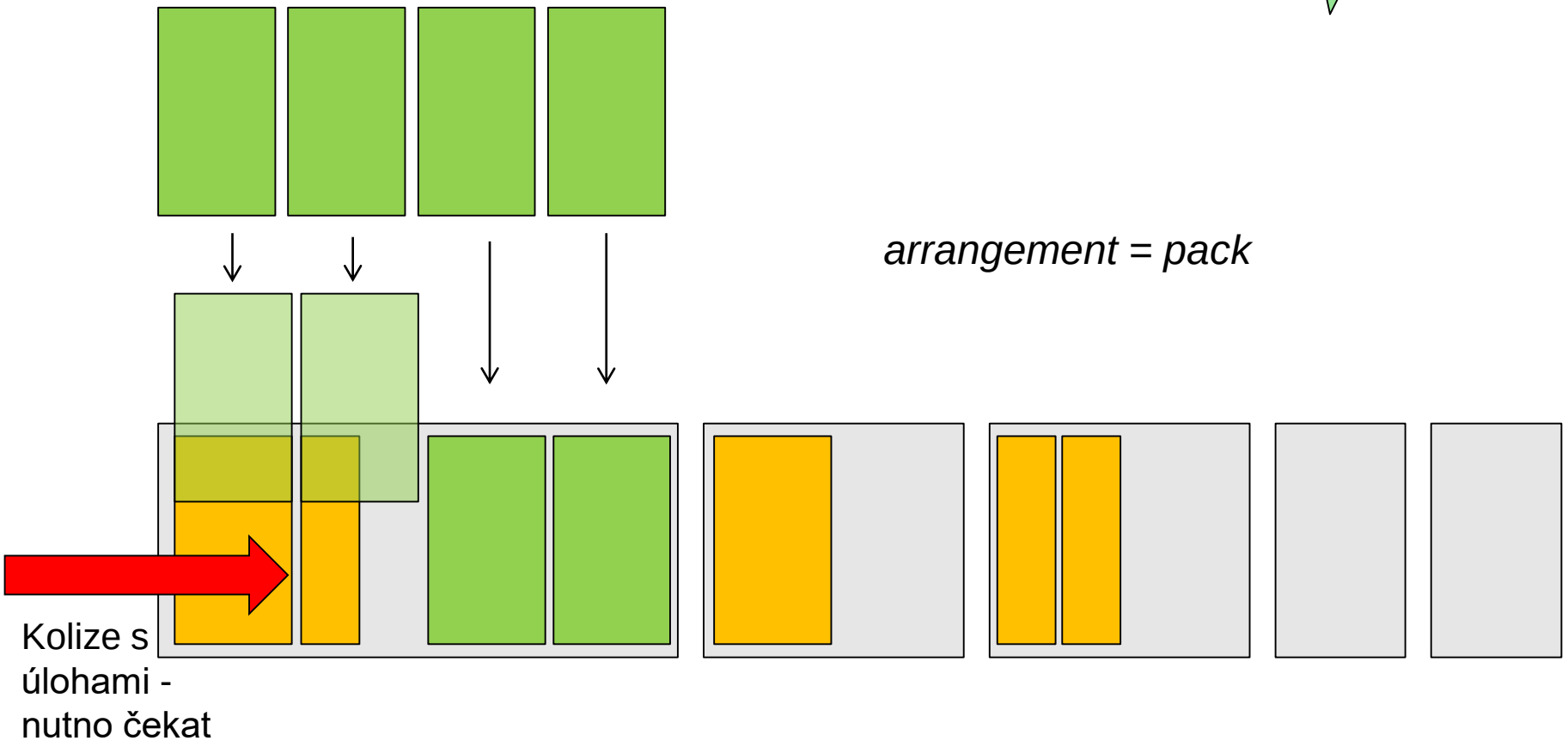
- free vs. pack vs. scatter



Příklady s plánováním

PBSPRO

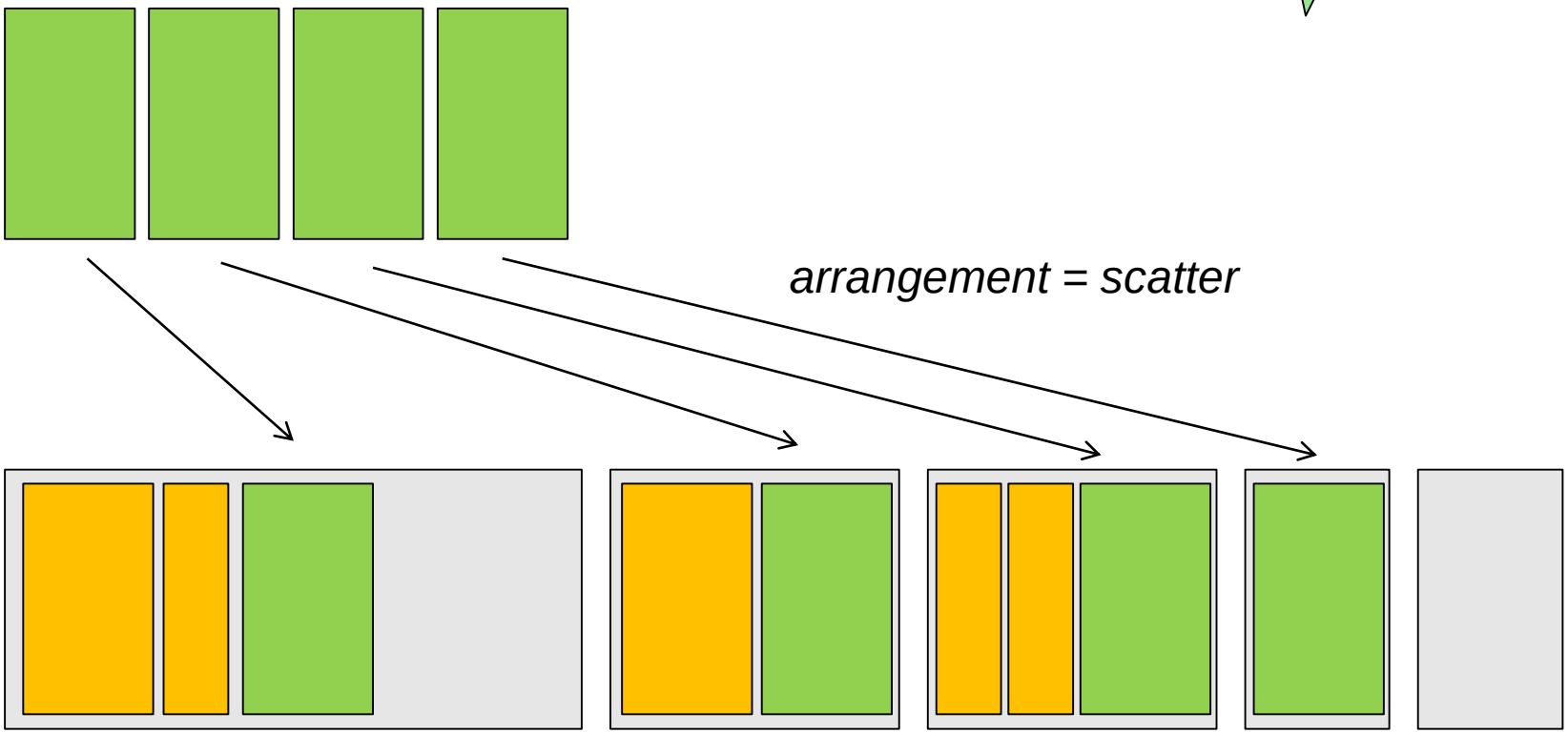
- **Plánování s chunky**
  - free vs. pack vs. scatter



Příklady s plánováním

PBSPRO

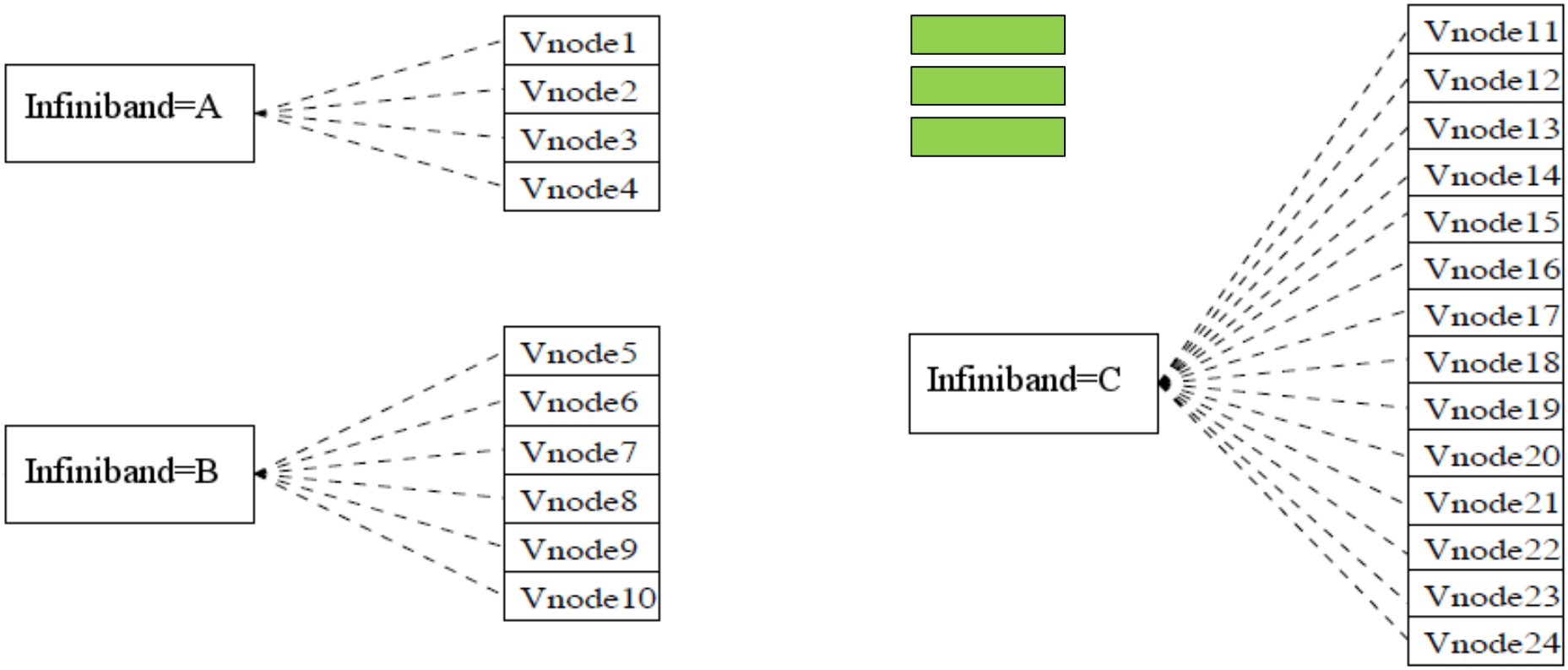
- **Plánování s chunky**
  - free vs. pack vs. scatter



Příklady s plánováním

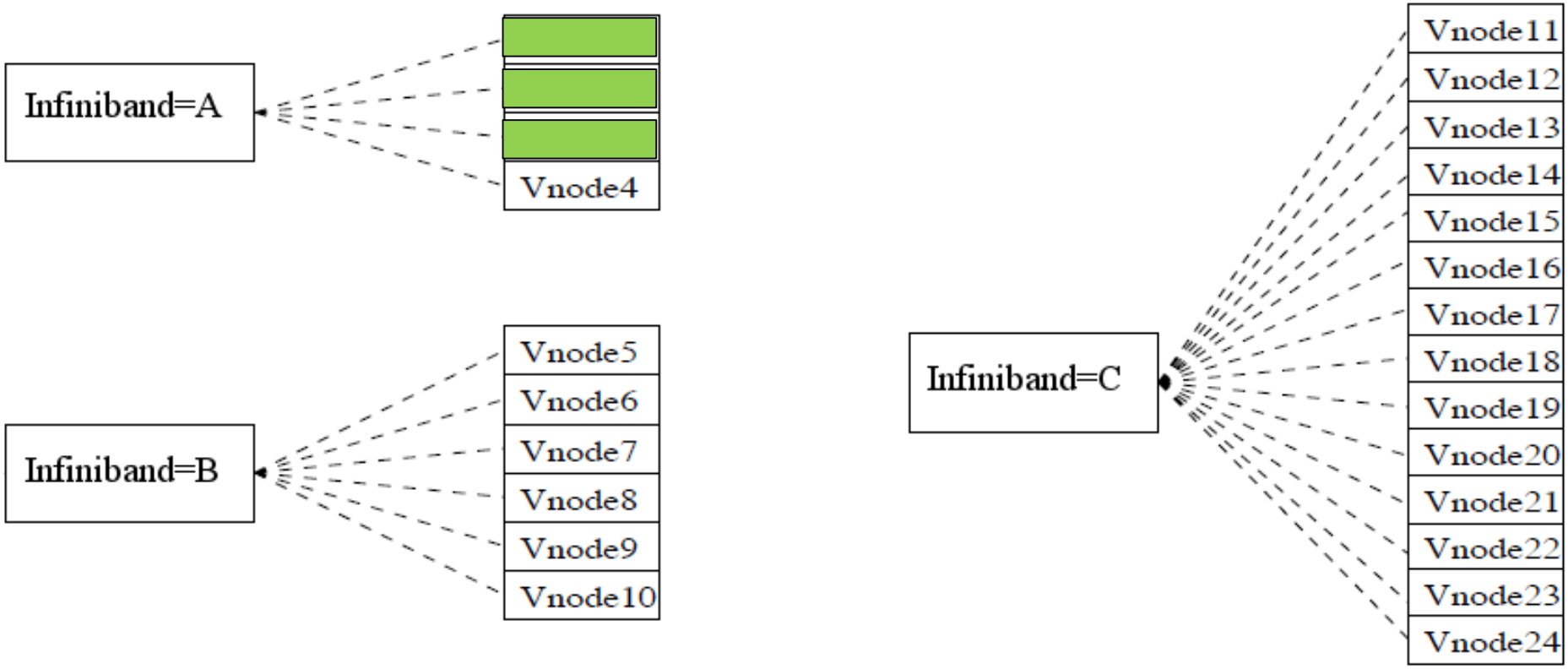
PBSPRO

- **Příklady „shlukování“ chunků** `[grouping]`
  - Grouping: `-l place=group=infiniband`



PBSPRO

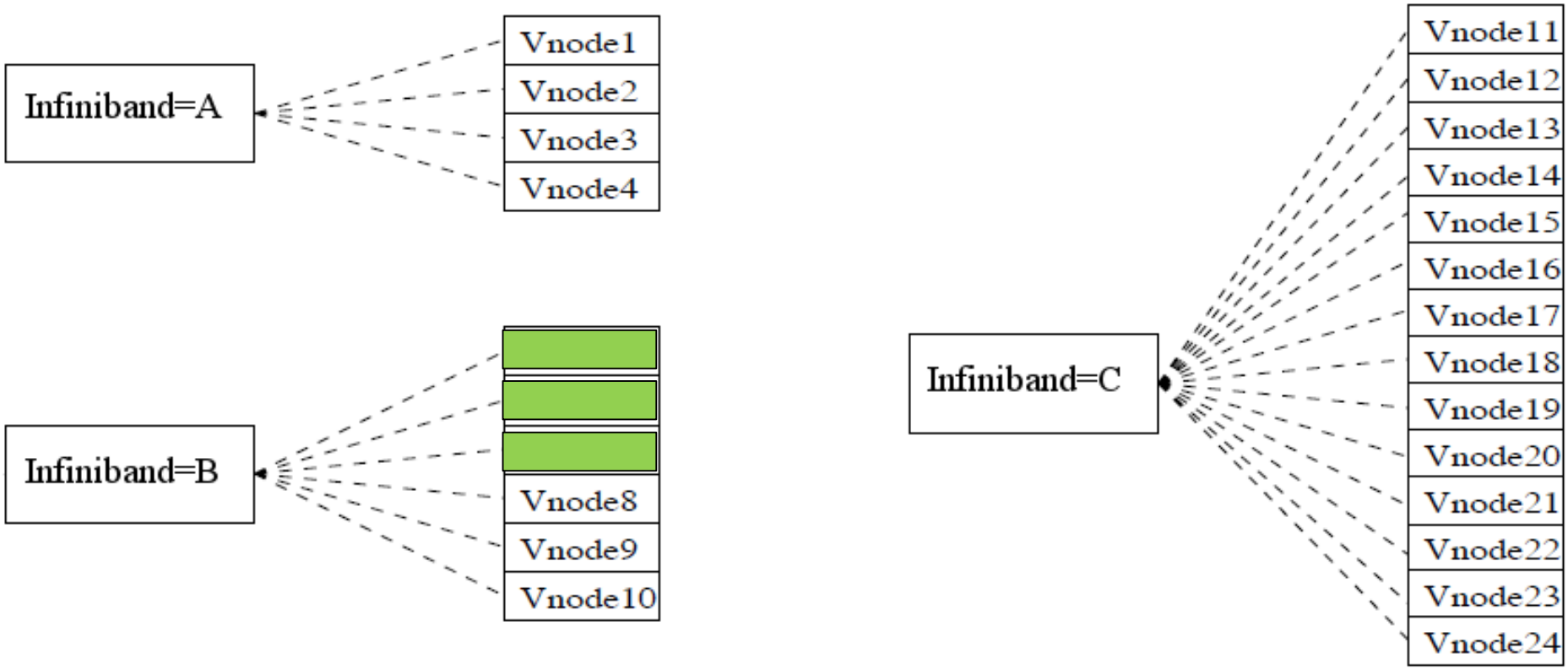
- **Příklady „shlukování“ chunků** [grouping]
  - Grouping: `-l place=group=infiniband`



Příklady s plánováním

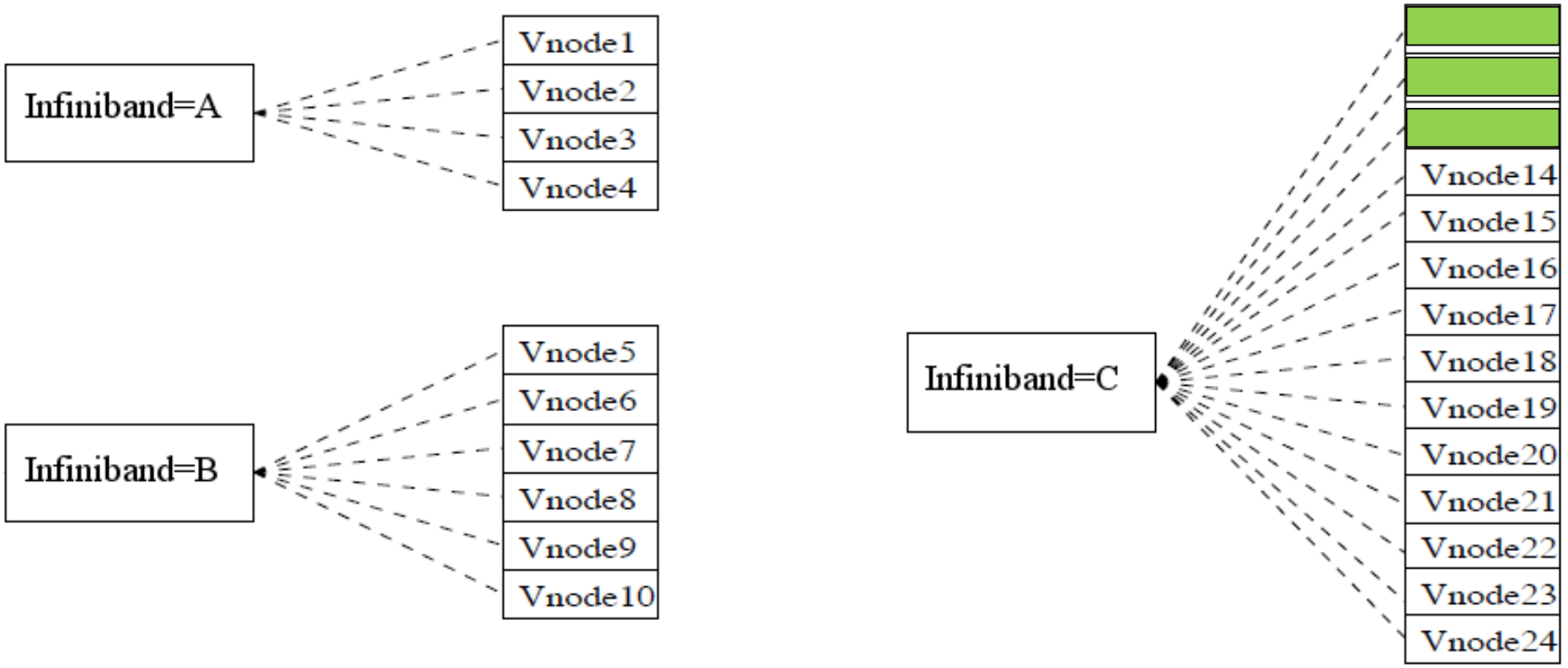
PBSPRO

- **Příklady „shlukování“ chunků** `[grouping]`
  - Grouping: `-l place=group=infiniband`



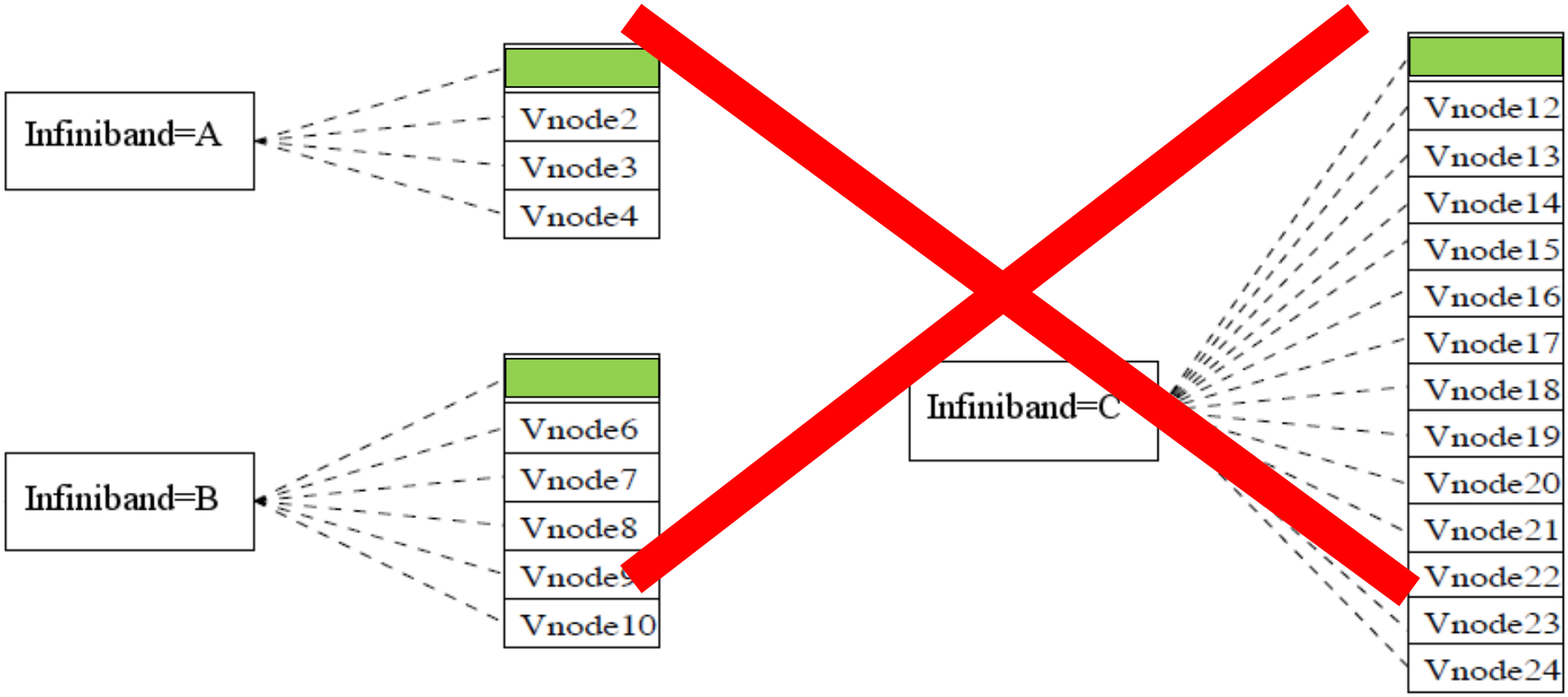
PBSPRO

- **Příklady „shlukování“ chunků** [grouping]
  - Grouping: `-l place=group=infiniband`



PBSPRO

- **Příklady „shlukování“ chunků** `[grouping]`
  - Grouping: `-l place=group=infiniband`



How to … specify requested resources IV.

Specifying memory resources (default = 400mb)**:**

- *general format:* `-l select=...:mem=…<suffix>`
  - e.g., `-l select=...:mem=100mb`
  - e.g., `-l select=...:mem=2gb`

Specifying job's maximum runtime (default = 24 hours)**:**

- it is necessary to specify an upper limit on job's runtime:
- *general format:* `-l walltime=[[hh:]mm:]ss`
  - e.g., `-l walltime=13:00`
  - e.g., `-l walltime=2:14:30`

How to … specify requested resources V.

Specifying requested scratch space:

- useful, when the application performs **I/O intensive operations** OR for **long-term computations** (reduces the impact of network failures)
- *requesting scratch is **mandatory in PBS Professional***
- ***scratch space size specification :*** `-l select=...:scratch_type=…<suffix>`
  - `e.g., -l select=...:scratch_local=500mb`

Types of scratches:

- ***scratch_local***
- ***scratch_ssd***
- ***scratch_shared***

How to … specify requested resources VI.

Specifying requested scratch space: cont'd

How to work with scratches?

- there is a **private scratch directory for particular job**
  - `/scratch/$USER/`**`job_$PBS_JOBID`** directory for job's scratch
  - the master directory `/scratch/$USER` is not available for writing
- **to make things easier,** there is a **`SCRATCHDIR` environment variable** available in the system
  - points to the assigned scratch space/location

Please, clean scratches after your jobs

- there is a **"`clean_scratch`" utility to perform safe scratch cleanup**
  - also reports scratch garbage from your previous jobs
  - for its usage, see later

How to … specify requested resources VII.

Specifying requested software licenses:

- necessary when an application requires a SW licence
  - the job becomes started once the requested licences are available
  - the information about a licence necessity is **provided within the application description** (see later)
- *general format:* `-l <lic_name>=<amount>`
  - e.g., `-l matlab=2`
  - e.g., `-l gridmath8=20`

(advanced) Dependencies on another jobs

- allows to create a workflow
  - e.g., to start a job once another one successfully finishes, breaks, etc.
- see qsub's "**`-W`**" option (`man qsub`)
  - e.g., `$ qsub ... -W depend=afterok:12345.arien-pro.ics.muni.cz`

How to … specify requested resources VII.

Specifying requested software licenses:

- necessary when an application requires a SW licence
  - the job becomes started once the requested licences are available
  - the information about a licence necessity is **provided within the application description** (see later)
- *general format:* `-l <lic_name>=<amount>`
  - e.g., `-l matlab=2`
  - e.g., `-l gridmath8=20`

(a

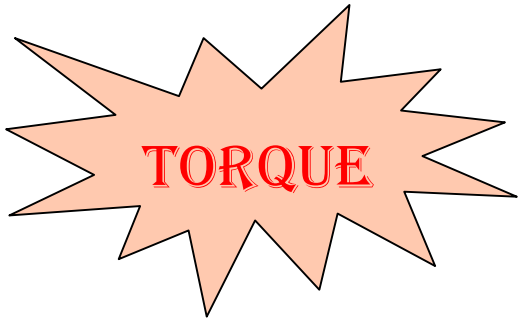
-
-

See more details about PBSpro:

https://metavo.metacentrum.cz/cs/seminars/seminar2017/presentation-Klusacek.pptx

SHORT guide:
https://metavo.metacentrum.cz/export/sites/meta/cs/seminars/seminar2017/tahak-pbs-pro-small.pdf

How to … specify requested resources I.



Node(s) specification:

- *general format:* `-l nodes=...`

Examples:

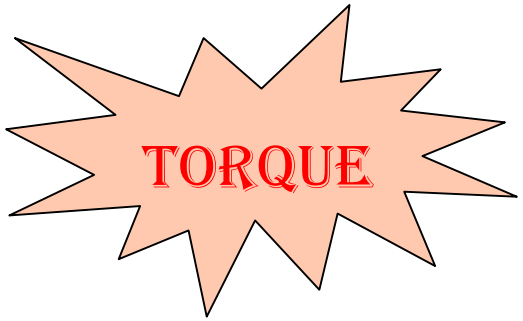
- 2 nodes:
  - `-l nodes=2`
- 5 nodes:
  - `-l nodes=5`

- by default, allocates just a single core on each node
  - → should be used together with **processors per node (PPN)** specification
- if "`-l nodes=...`" is not provided, just a single node with a single core is allocated

How to … specify requested resources II.

Processors per node (PPN) specification:

- *general format:* `-l nodes=...:ppn=...`

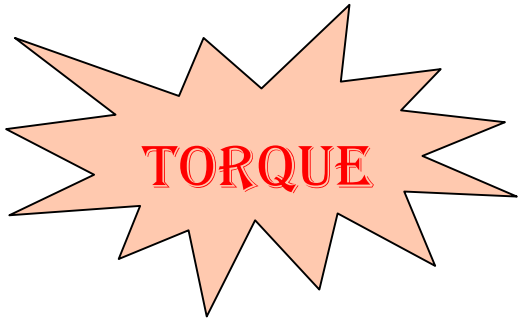


- 1 node with 4 cores:
  - `-l nodes=1:ppn=4`
- 5 nodes, each of them with 2 cores:
  - `-l nodes=5:ppn=2`

How to … specify requested resources III.

Other useful nodespec features:

- nodes just from a **single (specified) cluster** (suitable e.g. for MPI jobs):
  - *general format:* `-l nodes=…:cl_<cluster_name>`
  - e.g., `-l nodes=3:ppn=1:cl_doom`
- nodes with a **(specified) computing power** (based on SPEC benchmark):
  - *general format:* `-l nodes=…:minspec=XXX OR -l nodes=…:maxspec=XXX`
  - e.g., `-l nodes=3:ppn=1:minspec=10:maxspec=20`
- nodes located in a **specific location** (suitable when accessing storage in the location)
  - *general format:* `-l nodes=…:<brno|plzen|...>`
  - e.g., `-l nodes=1:ppn=4:brno`
- **exclusive node assignment**:
  - *general format:* `-l nodes=…#excl`
  - e.g., `-l nodes=1#excl`
- **negative** specification:
  - *general format:* `-l nodes=…:^<feature>`
  - e.g., `-l nodes=1:ppn=4:^amd64`
- …



A list of nodes' features can be found here: http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/props

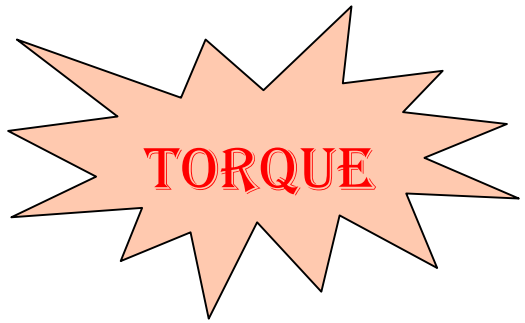
How to … specify requested resources IV.

Specifying memory resources (default = 400mb)**:**

- *general format:* `-l mem=...<suffix>`
  - e.g., `-l mem=100mb`
  - e.g., `-l mem=2gb`

Specifying job's maximum runtime (default = 24 hours)**:**

- it is necessary to specify an upper limit on job's runtime:
- *general format:* `-l walltime=[Xw][Xd][Xh][Xm][Xs]`
  - e.g., `-l walltime=13d`
  - e.g., `-l walltime=2h30m`



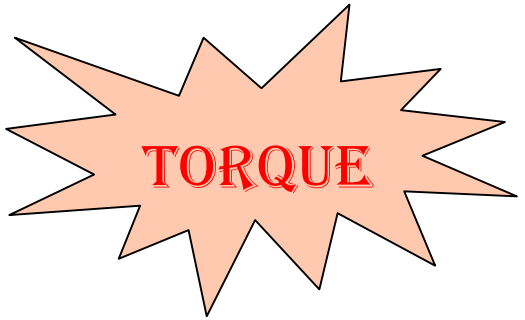
How to … specify requested resources V.

Specifying requested scratch space:

- useful, when the application performs **I/O intensive operations** OR for **long-term computations** (reduces the impact of network failures)
- ***scratch space size specification :*** `-l scratch=…<suffix>`
  - `e.g., -l scratch=500mb`

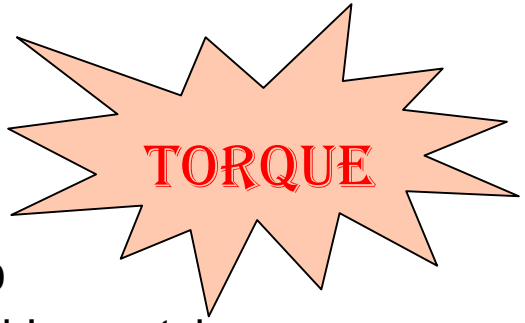
Types of scratches (default type: let the scheduler choose):

- ***local disks for every node of a job:***
  - use "**`:local`**" suffix, e.g. "`-l scratch=1g:local`"
- ***local SSD disks for every node of a job:***
  - use "**`:ssd`**" suffix, e.g. "`-l scratch=500m:ssd`"
- ***shared between the nodes of a job:***
  - shared over Infiniband , thus being also very fast
  - use "**`:shared`**" suffix, e.g. "`-l scratch=300g:shared`"
- *(optional)* ***allocated for just a first node of a job:***
  - use "**`:first`**" suffix, e.g. "`-l scratch=8g:first`" or "`-l scratch=50g:ssd:first`"



How to … specify requested resources VI.

Specifying requested scratch space: cont'd



How to work with the scratches?

- there is a **private scratch directory for particular job**
  - `/scratch/$USER/`**`job_$PBS_JOBID`** directory for job's scratch
  - the master directory `/scratch/$USER` is not available for writing
- **to make things easier,** there is a **`SCRATCHDIR` environment variable** available in the system
  - points to the assigned scratch space/location

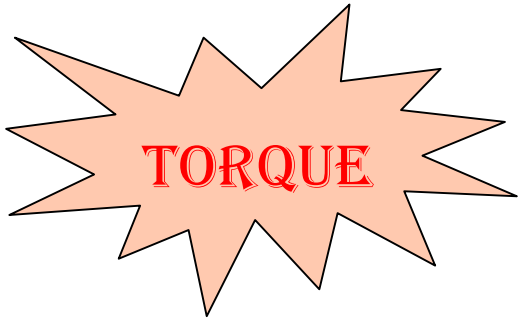
Please, clean scratches after your jobs

- there is a **"`clean_scratch`" utility to perform safe scratch cleanup**
  - also reports scratch garbage from your previous jobs
  - for its usage, see later

How to … specify requested resources VII.

Specifying requested software licenses:

- necessary when an application requires a SW licence
  - the job becomes started once the requested licences are available
  - the information about a licence necessity is **provided within the application description** (see later)
- *general format:* `-l <lic_name>=<amount>`
  - e.g., `-l matlab=2`
  - e.g., `-l gridmath8=20`



…

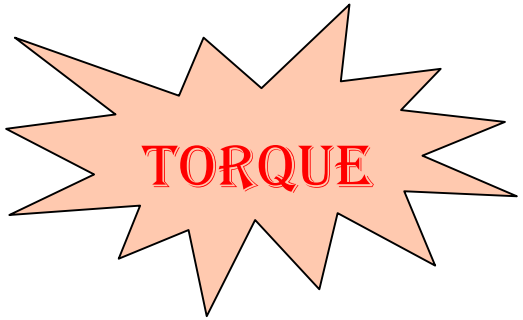
(advanced) Dependencies on another jobs

- allows to create a workflow
  - e.g., to start a job once another one successfully finishes, breaks, etc.
- see qsub's "**`-W`**" option (`man qsub`)
  - e.g., `$ qsub ... -W depend=afterok:12345.arien.ics.muni.cz`

How to … specify requested resources VII.

Specifying requested software licenses:

- necessary when an application requires a SW licence
  - the job becomes started once the requested licences are available
  - the information about a licence necessity is **provided within the application description** (see later)
- *general format:* `-l <lic_name>=<amount>`
  - e.g., `-l matlab=2`
  - e.g., `-l gridmath8=20`



…

(advanced) Dependencies on another jobs

-
-
  - e.g., `$ qsub ... -W depend=afterok:12345.alien.ics.muni.cz`

More information available at:

https://wiki.metacentrum.cz/wikiold/Spouštění_úloh_v_plánovači#Stru.C4.8Dn.C3.A9_shrnut.C3.AD_pl.C3.A1nov.C3.A1n.C3.AD_.C3.BAloh

How to … specify requested resources VIII.

Questions and Answers:

- *Why is it necessary to specify the resources in a proper number/amount?*
  - because when a job consumes more resources than announced, it will be **killed** by us (you'll be informed)
    - otherwise it may influence other processes running on the node
- *Why is it necessary not to ask for excessive number/amount of resources?*
  - the jobs having smaller resource requirements are started (i.e., get the time slot) **faster**
- *Any other questions?*

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- **How to … run an interactive job**
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

How to … run an interactive job I.

Interactive jobs:

- result in getting a prompt on a single **(master) node**
  - one may perform interactive computations
  - the other nodes, if requested, remain allocated and accessible (see later)

- How to **ask for** an **interactive job**?
  - add the option "`-I`" to the qsub command
  - e.g., `qsub -I -l select=1:ncpus=4`

- **Example** (valid for this demo session):
  - `qsub -I -q MetaSeminar -l select=1`

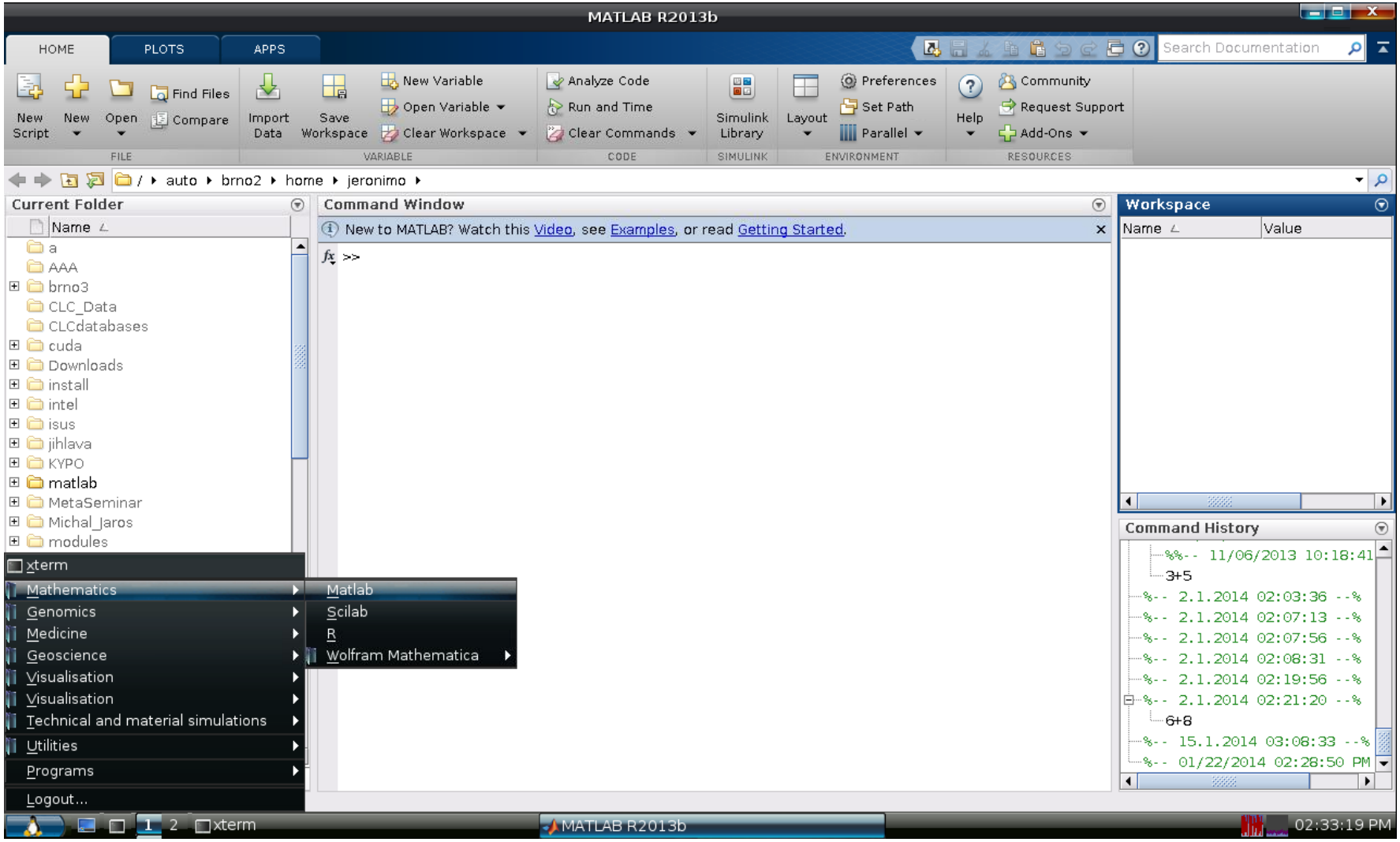
How to … run an interactive job II.

Textual mode: simple

Graphical mode:

- *(preffered)* **remote desktops based on VNC servers (pilot run):**
- available from frontends as well as computing nodes (interactive jobs)
  - `module add gui`
  - `gui start [-s] [-w] [-g GEOMETRY] [-c COLORS]`
    - uses one-time passwords
    - allows to access the VNC via a supported **TigerVNC client** or **WWW browser**
    - **allows SSH tunnels** to be able to connect with a wide-range of clients
    - allows to specify several parameters (e.g., **desktop resolution, color depth**)
    - `gui info [-p]` ... displays active sessions (optionally with login password)
    - `gui stop [sessionID]` ... allows to stop/kill an active session
- see more info at https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Remote_desktop

How to … run an interactive job II.



How to … run an interactive job II.

Graphical mode (further options):

- *(fallback)* **tunnelling a display through `ssh`** (Windows/Linux)**:**
  - connect to the frontend node having SSH forwarding/tunneling enabled:
    - Linux: `ssh -X skirit.metacentrum.cz`
    - Windows:
      - install an XServer (e.g., Xming)
      - set Putty appropriately to enable X11 forwarding when connecting to the frontend node
        - Connection → SSH → X11 → Enable X11 forwarding
  - ask for an interactive job, **adding "`-x`" option** to the qsub command
    - e.g., `qsub -I -x -l select=... ...`

- *(tech. gurus)* **exporting a display** from the master node to a Linux box:
  - `export DISPLAY=mycomputer.mydomain.cz:0.0`
  - on a Linux box, run "`xhost +`" to allow all the remote clients to connect
    - be sure that your display manager allows remote connections

How to … run an interactive job III.

Questions and Answers:

- *How to **get an information** about the **other nodes allocated** (if requested)?*
  - `master_node$ cat $PBS_NODEFILE`
  - works for batch jobs as well
- *How to **use the other nodes allocated**? (holds for batch jobs as well)*
  - MPI jobs use them automatically
  - otherwise, use the **pbsdsh** utility (see `"man pbsdsh"` for details) to run a remote command
  - if the pbsdsh does not work for you, use the **ssh** to run the remote command
- *Any other questions?*

How to … run an interactive job III.

Questions and Answers:

- *How to **get an information** about the **other nodes allocated** (if*
-)
- un a
-

Hint:

- there are several useful environment variables one may use
  - `$ set | grep PBS`
- e.g.:
  - PBS_JOBID … job's identificator
  - PBS_NUM_NODES, PBS_NUM_PPN … allocated number of nodes/processors
  - PBS_O_WORKDIR … submit directory
  - …

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- **How to … use application modules**
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

How to … use application modules I.

Application modules:

- the **modullar subsystem** provides a user interface to modifications of user environment, which are necessary for running the requested applications
- allows to “add” an application to a user environment

- **getting a list** of available application modules:
  - `$ module avail`
  - `$ module avail matl`
  - https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Kategorie:Applications
    - provides the documentation about modules’ usage
    - besides others, includes:
      - information whether it is necessary to ask the scheduler for an available licence
      - information whether it is necessary to express consent with their licence agreement

How to … use application modules II.

Application modules:

- **loading** an application into the environment:
  - `$ module add <modulename>`
  - e.g., `module add maple`
- **listing** the already loaded modules:
  - `$ module list`
- **unloading** an application from the environment:
  - `$ module del <modulename>`
  - e.g., `module del openmpi`

- ***Note:*** *An application may require to express consent with its licence agreement before it may be used (see the application's description). To provide the aggreement, visit the following webpage:* https://metavo.metacentrum.cz/cs/myaccount/licence.html

- for more information about application modules, see https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Application_modules

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- **How to … run a batch job**
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

How to … run a batch job I.

Batch jobs:

- perform the computation as described in their **startup script**
  - the submission results in getting **a job identifier**, which further serves for getting more information about the job (see later)

- How to **submit** a **batch job**?
  - add the reference to the startup script to the qsub command
  - e.g., `qsub -l select=3:ncpus=4` **`<myscript.sh>`**

- **Example** (valid for this demo session):
  - `qsub` **`-q MetaSeminar`** `-l select=1` **`myscript.sh`**
  - results in getting something like "`12345.arien-pro.ics.muni.cz`"

How to … run a batch job I.

B

- for
- **Hint:**
  - create the file `myscript.sh` with the following content:
    - `$ vim myscript.sh`

      ```
      #!/bin/bash

      # my first batch job
      uname -a
      ```
  - see the standard output file (`myscript.sh.o<JOBID>`)
    - `$ cat myscript.sh.o<JOBID>`
- `qsub -q MetaSeminar -l select=1 myscript.sh`
- results in getting something like "`12345.arien-pro.ics.muni.cz`"

How to … run a batch job II.

Startup script preparation/skelet: (non IO-intensive computations)

```
#!/bin/bash

DATADIR="/storage/brno2/home/$USER/"    # shared via NFSv4
cd $DATADIR

# ... load modules & perform the computation ...
```

- **further details** – see https://wiki.metacentrum.cz/wiki/How_to_compute/Requesting_resources

How to … run a batch job III.

Startup script preparation/skelet: (IO-intensive computations or long-term jobs)

```
#!/bin/bash

# set a handler to clean the SCRATCHDIR once finished
trap 'clean_scratch' TERM EXIT
# if temporal results are important/useful
# trap 'cp -r $SCRATCHDIR/neuplna.data $DATADIR && clean_scratch' TERM

# set the location of input/output data
# DATADIR="/storage/brno2/home/$USER/"
DATADIR="$PBS_O_WORKDIR"

# prepare the input data
cp $DATADIR/input.txt $SCRATCHDIR || exit 1

# go to the working directory and perform the computation
cd $SCRATCHDIR

# ... load modules & perform the computation ...

# copy out the output data
# if the copying fails, let the data in SCRATCHDIR and inform the user
cp $SCRATCHDIR/output.txt $DATADIR || export CLEAN_SCRATCH=false
```

How to … run a batch job IV.

Using the application modules within the batch script:

- include the initialization line ("`source …`") if necessary:
  - if you experience problems like "`module: command not found`"

```
source /software/modules/init
...
module add maple
```

Getting the job's standard output and standard error output:

- once finished, there appear **two files** in the directory, which the job has been started from:
  - *<job_name>*`.o`*<jobID>* ... standard output
  - *<job_name>*`.e`*<jobID>* ... standard error output
  - the `<job_name>` can be modified via the "`-N`" qsub option

How to … run a batch job V.

Job attributes specification:

in the case of batch jobs, the requested resources and further job information (*job attributes* in short) may be specified either on the command line (see "`man qsub`") or directly within the script:

- by adding the "`#PBS`" directives (see "`man qsub`"):

```
#PBS -N Job_name
#PBS -l select=2:ncpus=1:mem=320kb:scratch_local=100m
#PBS -m abe
#
< … commands … >
```

- the submission may be then simply performed by:
  - `$ qsub myscript.sh`
    - if options are provided both in the script and on the command-line, the **command-line arguments override the script ones**

How to … run a batch job VI. (complex example)

```
#!/bin/bash
#PBS -l select=1:ncpus=2:mem=500mb:scratch_local=100m
#PBS -m abe

# set a handler to clean the SCRATCHDIR once finished
trap "clean_scratch" TERM EXIT

# set the location of input/output data
DATADIR="$PBS_O_WORKDIR"

# prepare the input data
cp $DATADIR/input.mpl $SCRATCHDIR || exit 1

# go to the working directory and perform the computation
cd $SCRATCHDIR

# load the appropriate module
module add maple

# run the computation
maple input.mpl

# copy out the output data (if it fails, let the data in SCRATCHDIR and inform the user)
cp $SCRATCHDIR/output.gif $DATADIR || export CLEAN_SCRATCH=false
```

How to … run a batch job VII.

Questions and Answers:

- *Should you prefer batch or interactive jobs?*
  - definitely the **batch ones** – they use the computing resources **more effectively**
  - use the interactive ones just for testing your startup script, GUI apps, or data preparation

- *Any other questions?*

How to … run a batch job VIII.

Example:

- Create and submit a batch script, which performs a simple Maple computation, described in a file:

```
plotsetup(gif, plotoutput=`myplot.gif`,
    plotoptions=`height=1024,width=768`);
plot3d( x*y, x=-1..1, y=-1..1, axes = BOXED, style =
    PATCH);
```

  - process the file using Maple (from a batch script):
    - hint: `$ maple <filename>`

How to … run a batch job VIII.

Example:

- Create and submit a batch script, which performs a simple Maple computation, described in a file:

```
plotsetup(gif, plotoutput=`myplot.gif`,
    plotoptions=`height=1024,width=768`);
plot3d( x*y, x=-1..1, y=-1..1, axes = BOXED, style =
    PATCH);
```

  - process the file using Maple (from a batch script):
    - hint: `$ maple <filename>`

Hint:

- see the solution at `/storage/brno2/home/jeronimo/MetaSeminar/latest/Maple`

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- **How to … determine a job state**
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

How to … determine a job state I.

Job identifiers

- every job (no matter whether interactive or batch) is **uniquely identified** by its identifier (JOBID)
  - e.g., `12345.arien-pro.ics.muni.cz`
- to obtain any information about a job, the **knowledge of its identifier is necessary**
  - how to list all the recent jobs?
    - graphical way – PBSMON: http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/jobs/allJobs
    - `frontend$ qstat` (run on any frontend)
      - **to include finished ones**, run `$ qstat -x`
  - how to list all the recent jobs of a specific user?
    - graphical way – PBSMON: https://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/jobs/my
    - `frontend$ qstat -u <username>` (again, any frontend)
      - **to include finished ones**, run `$ qstat -x -u <username>`

How to … determine a job state II.

How to determine a job state?

- graphical way – see PBSMON
  - list all your jobs and click on the particular job's identifier
  - http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/jobs/my
- textual way – `qstat` command (see `man qstat`)
  - brief information about a job: `$ qstat JOBID`
    - informs about: job's state (*Q=queued*, *R=running*, *E=exiting*, *F=finished*, …), job's runtime, …
  - complex information about a job: `$ qstat -f JOBID`
    - shows all the available information about a job
    - useful properties:
      - *exec_host* -- the nodes, where the job did really run
      - *resources_used, start/completion time, exit status, …*

How to … determine a job state III.

Hell, when my jobs will really start?

- nobody can tell you ☺
  - the **God/scheduler decides** (based on the other job's finish)
  - we're working on an estimation method to inform you about its probable startup

- check the **queues' fulfilment**: http://metavo.metacentrum.cz/cs/state/jobsQueued
  - the higher fairshare (queue's AND job's) is, the earlier the job will be started
- **stay informed** about job's startup / finish / abort (via email)
  - by default, just an information about job's abortation is sent
  - → when submitting a job, add "`-m abe`" option to the `qsub` command to be informed about all the job's states
    - or "`#PBS -m abe`" directive to the startup script

How to … determine a job state IV.

Monitoring running job's stdout, stderr, working/temporal files

1. via ssh, log in directly to the execution node(s)
   - how to get the job's execution node(s)?
- to examine the working/temporal files, navigate directly to them
  - logging to the execution node(s) is necessary -- even though the files are on a shared storage, their content propagation takes some time
- to examine the stdout/stderr of a running job:
  - navigate to the `/var/spool/pbs/spool/` directory and examine the files:
    - `$PBS_JOBID.OU` for standard output (stdout – e.g., "`1234.arien-pro.ics.muni.cz.OU`")
    - `$PBS_JOBID.ER` for standard error output (stderr – e.g., "`1234.arien-pro.ics.muni.cz.ER`")

Job's forcible termination

- `$ qdel JOBID` (the job may be terminated in any previous state)
- during termination, the job turns to *E (exiting)* and finally to *F (finished)* state

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- **How to … run a parallel/distributed computation**
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

How to … run a parallel/distributed computation I.

Parallel jobs (OpenMP):

- if your application is able to use multiple threads via a shared memory, **ask for a single node with multiple processors**

```
$ qsub -l select=1:ncpus=...
```

- **make sure**, that before running your application, the **OMP_NUM_THREADS** environment variable **is appropriately set**
  - otherwise, your application will use all the cores available on the node
    - → and influence other jobs…
  - usually, setting it to **NCPUs** is OK

```
$ export OMP_NUM_THREADS=$PBS_NUM_PPN
```

How to … run a parallel/distributed computation II.

Distributed jobs (MPI):

- if your application consists of multiple processes communicating via a message passing interface, **ask for a set of nodes** (with arbitrary number of processors)

  ```
  $ qsub -l select=...:ncpus=...
  ```

- **make sure**, that before running your application, the appropriate **openmpi/mpich2/mpich3/lam** module is loaded into the environment

  ```
  $ module add openmpi
  ```

  - then, you can use the `mpirun/mpiexec` routines

    ```
    $ mpirun myMPIapp
    ```

    - it's **not necessary** to provide these routines neither with the number of nodes to use ("`-np`" option) nor with the nodes itself ("`--hostfile`" option)
      - the computing nodes are **automatically detected** by the openmpi/mpich/lam

How to … run a parallel/distributed computation III.

Distributed jobs (MPI): accelerating their speed I.

- to accelerate the speed of MPI computations, ask just for the nodes interconnected by a **low-latency Infiniband interconnection**
  - all the nodes of a cluster are interconnected by Infiniband
  - there are several clusters having an Infiniband interconnection
    - mandos, minos, hildor, skirit, tarkil, nympha, gram, luna, manwe (MetaCentrum)
    - zewura, zegox, zigur, zapat (CERIT-SC)

- *submission example:*

```
$ qsub -l select=4:ncpus=2 -l place=group=infiniband MPIscript.sh
```

- *starting an MPI computation using an Infiniband interconnection:*
  - in a common way: `$ mpirun myMPIapp`
    - the Infiniband will be automatically detected
  - is the Infiniband available for a job? **check using** `$ check-IB`

How to … run a parallel/distributed computation IV.

Questions and Answers:

- *Is it possible to simultaneously use both OpenMP and MPI?*
  - Yes, it is. But be sure, how many processors your job is using
    - appropriately set the "-np" option (MPI) and the OMP_NUM_THREADS variable (OpenMP)
      - **OpenMPI:** a single process on each machine (`mpirun -pernode …`) being threaded based on the number of processors (`export OMP_NUM_THREADS=$PBS_NUM_PPN`)

- Any other questions?

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- **Another mini-HowTos …**
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

Another mini-HowTos … I.

- **how to make your application available within MetaVO?**
  - *commercial apps:*
    - ***assumption:*** you **own a license**, and the **license allows the application to be run on our infrastructure** (nodes not owned by you, located elsewhere, etc.)
    - once installed, we can **restrict its usage** just for you (or for your group)
  - *open-source/freeware apps:*
    - you can compile/install the app in your HOME directory
    - **OR** you can install/compile the app on your own and ask us to make it available in the software repository
      - compile the application in your HOME directory
      - **prepare a modulefile** setting the application environment
        - inspire yourself by modules located at `/packages/run/modules-2.0/modulefiles`
      - **test the app/modulefile**
        - `$ export MODULEPATH=$MODULEPATH:$HOME/myapps`
      - see https://wiki.metacentrum.cz/wiki/How_to_install_an_application
    - **OR** you can ask us for preparing the application for you

Another mini-HowTos … II.

- **how to ask for nodes equipped by GPU cards?**
  - determine, **how many GPUs** your application will need (`-l ngpus=X`)
    - consult the HW information page: http://metavo.metacentrum.cz/cs/state/hardware.html
  - determine, **how long** the application will run (if you need more, let us know)
    - `gpu` queue … maximum runtime 1 day
    - `qpu_long` queue … maximum runtime 1 week
  - make the submission:
    - $ qsub -l select=1:ncpus=4:mem=10g:**ngpus=1 -q gpu_long** –l walltime=4d …
    - specific GPU cards by restricting the cluster:
      `qsub -l select=...:cl_doom=true ...`
  - **do not change** the CUDA_VISIBLE_DEVICES environment variable
    - it's automatically set in order to determine the GPU card(s) that has/have been reserved for your application
  - details about GPU cards performance within MetaVO:
    - see http://metavo.metacentrum.cz/export/sites/meta/cs/seminars/seminar5/gpu_fila.pdf
  - general information: https://wiki.metacentrum.cz/wiki/GPU_clusters

Another mini-HowTos … III.

How to ask for nodes equipped with Xeon Phi?

phi[1-6].cerit-sc.cz

- new cluster purchased by CERIT-SC
  - available through "`phi`" queue (PBS Pro) on zuphux.cerit-sc.cz frontend

```
zuphux$ module add pbspro-client
zuphux$ qsub -q phi -l select=…
```

- **the newest generation of Xeon Phi** (7210 Knights Landing)
  - currently, the only installation in the CR
- see more details at https://metavo.metacentrum.cz/export/sites/meta/cs/seminars/seminar2017/meta-xeonphi-17.pdf

Installation specifics: central storages available through SCP only

Central storages of phi.cerit-sc.cz cluster

Central storages currently not available through NFS

i.e. /storage/XXX/home/<username>

- technical reasons
- data storages available through SCP
  - in most cases, just a minor change in your scripts

NFS sdílení (aktuální stav)	SCP sdílení (phi[1-6].cerit-sc.cz)
DATADIR="**/storage/brno3-cerit/home/<username>/example**" **cp** –R $DATADIR/mydata $SCRATCHDIR	DATADIR="**storage-brno3-cerit.metacentrum.cz:~/example**" **scp** –R $DATADIR/mydata $SCRATCHDIR

The number of data storages is above the viable limit ☹

- we're looking for possibilities, how to make the storages more well arranged

  e.g a single big storage? („object storage")
- the topic of intensive research in current and future years

Another mini-HowTos … III.

- **how to transfer large amount of data to MetaVO nodes?**
  - copying through the frontends/computing nodes may not be efficient (hostnames are *storage-XXX.metacentrum.cz*)
    - XXX = brno2, brno3-cerit, plzen1, budejovice1, praha1, ...
  - → connect directly to the storage frontends (via **SCP** or **SFTP**)
    - `$ sftp storage-brno2.metacentrum.cz`
    - `$ scp <files> storage-plzen1.metacentrum.cz:<dir>`
    - etc.
    - use FTP only together with the Kerberos authentication
      - otherwise insecure
- **how to access the data arrays?**
  - **easier:** use the SFTP/SCP protocols (suitable applications)
  - **OR mount the storage arrays directly to your computer**
    - https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Mounting_data_storages_on_local_station

Another mini-HowTos … IV.

- **how to get information about your quotas?**
  - by default, all the users have quotas on the storage arrays (per array)
    - may be different on every array
  - to get an information about your quotas and/or free space on the storage arrays
    - **textual way:** log-in to a MetaCentrum frontend and see the *"motd"* (information displayed when logged-in)
    - **graphical way:**
      - *your quotas:* https://metavo.metacentrum.cz/cs/myaccount/kvoty
      - *free space:* http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/nodes/physical
- **how to restore accidentally erased data**
  - the storage arrays (⇒ including homes) are regularly backed-up
    - several times a week
  - → write an email to meta@cesnet.cz specifying what to restore

Another mini-HowTos … V.

- **how to secure private data?**
  - by default, all the data are readable by everyone
  - → use **common Linux/Unix mechanisms/tools** to make the data private
    - `r`,`w`,`x` rights for *user*, *group*, *other*
    - e.g., `chmod go= <filename>`
      - see `man chmod`
      - use "`-R`" option for recursive traversal (applicable to directories)

- **how to share data among working group?**
  - ask us for creating a **common unix user group**
    - user administration will be up to you (GUI frontend is provided)
  - **use common unix mechanisms** for sharing data among a group
    - see "`man chmod`" and "`man chgrp`"
  - see https://wiki.metacentrum.cz/wikiold/Sdílení_dat_ve_skupině

Another mini-HowTos … VI.

- **how to use SGI UV2000 nodes? (`ungu,urga .cerit-sc.cz`)**
  - because of their nature, these nodes **are not** – by default – **used by common jobs**
    - to be available for jobs that really need them
  - to use these nodes, one has to **submit the job to a specific queue** called **"uv"**
    - `$ qsub -l select=1:ncpus=X:mem=Yg` **`-q uv`**
      `-l walltime=Zd ...`
      - to use a specific UV node, submit e.g. with
        `$ qsub` **`-q uv`** `-l select=1:ncpus=X:`**`cl_urga=true`** `...`
  - for convenience, **submit from `zuphux.cerit-sc.cz` frontend**
    - **and until the transformation to PBSpro finishes, load "pbspro-client" mod.**
      - `zuphux$ module add pbspro-client`
      - `zuphux$ qsub …`

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- **Přídavek – „Jak sejmout MetaCentrum?“**
- What to do if something goes wrong?

- Real-world examples

Jak „sejmout“ MetaCentrum?

(aneb Jak správně zacházet s výpočty a daty)

Jak „sejmout“ MetaCentrum?

(aneb Jak správně zacházet s výpočty a daty)

Nebojte se infrastrukturu používat – pokud něco „sejmete“, je to naše chyba. ☺

Kopírování objemných dat

Nekopírujte objemnější data přes čelní uzly

- pomalejší kopírování
- zatížení čelních uzlů

Kopírování objemných dat

Nekopírujte objemnější data přes čelní uzly

- pomalejší kopírování
- zatížení čelních uzlů

Data lze kopírovat přímo

skrze přístupové uzly úložišť

- SCP, WinSCP

  /storage/brno2 -> storage-brno2.metacentrum.cz

  /storage/brno3-cerit -> storage-brno3-cerit.metacentrum.cz

  …

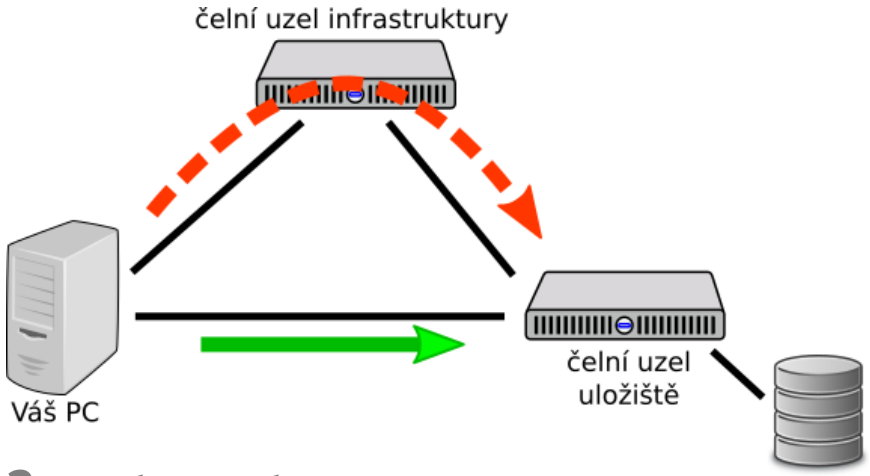
  - https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Working_with_data/Direct_access_to_data_storages

Kopírování objemných dat

Nekopírujte objemnější data přes čelní uzly

- pomalejší kopírování
- zatížení čelních uzlů

Data lze kopírovat přímo skrze přístupové uzly úložišť



- SCP, WinSCP

  /storage/brno2 -> storage-brno2.metacentrum.cz

  /storage/brno3-cerit -> storage-brno3-cerit.metacentrum.cz

  …

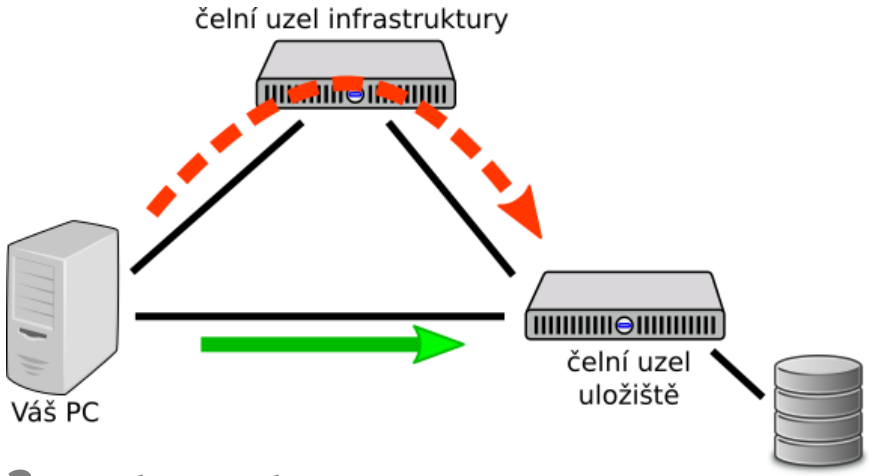
  - https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Working_with_data/Direct_access_to_data_storages

Kopírování objemných dat

Nekopírujte objemnější data přes čelní uzly

- pomalejší kopírování
- zatížení čelních uzlů

Data lze kopírovat přímo skrze přístupové uzly úložišť



- SCP, WinSCP

  /storage/brno2 -> storage-brno2.metacentrum.cz

  /storage/brno3-cerit -> storage-brno3-cerit.metacentrum.cz

  …

  - https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Working_with_data/Direct_access_to_data_storages

Výpočty nad centrálními úložišti

Nespouštějte výpočty nad daty v centrálním úložišti

- zejména s intenzivnějšími I/O operacemi
  - vede k ochromení úložiště a prodloužení doby běhu úlohy

Kopírujte pracovní data do scratche

- *pozitivní vlivy:*
  - zrychlení běhu úlohy
  - odstranění závislosti na dostupnosti centrálního úložiště
- postup:
  - $ qsub –l select=1:ncpus=4:**scratch_local=1gb** …
    cp /storage/…/home/<username>/mydata $SCRATCHDIR/mydata
    cd $SCRATCHDIR
    <compute>
    cp $SCRATCHDIR/results /storage/…/home/<username>/results
  - …:scratch_shared=Xgb … *sdílený scratch (distribuované úlohy)*
  - …:scratch_ssd=Xgb … *lokální scratch – SSD disky*

Data ve scratchích

Promazávejte data po ukončených úlohách

- pracovní data ve scratchích obdobou pracovních dat v paměti
  - po korektním ukončení úlohy by měla být odmazána
- scratche automatizovaně promazávány
  - avšak většinou až 2 týdny po ukončení úlohy

Promazávání scratchů v úlohách

- utilita „`clean_scratch`”
- postup:

```
trap ‘clean_scratch’ TERM EXIT
...
cp results /storage/...  || export CLEAN_SCRATCH=false
```

  - při nedostupnosti centrálního úložiště (selhání vykopírování výsledků) data ponechá ve scratchi
    - informuje o korektním promazání scratche či ponechání dat
    - informuje o nepromazaných scratchích z jiných úloh (na daném uzlu)

Nadužívání místa na úložištích

Centrální (pracovní) úložiště nejsou nekonečná ☹

/storage/<MĚSTO>

Promazávejte/odsunujte nepotřebná data

- *možnosti:*
  - odmazání nepotřebných dat
  - odsun aktuálně nepotřebných dat do archivních úložišť
    viz https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Archival_data_handling

Velké výstupy úloh a zápisy do `/tmp`

Výpočetní uzly mají omezené kvóty (1GB) pro zápis na lokální disky (mimo scratche)

- vliv na zápisy aplikací do `/tmp` (dočasné pracovní soubory)
- vliv na objemné výstupy úloh (stdout, stderr)

Přesměrovávejte objemnější výstupy do scratche

- přesměrování dočasného úložiště pracovních souborů
  mnoho aplikací reflektuje systémovou proměnnou TMPDIR
  - nastavení: `export TMPDIR=$SCRATCHDIR`
- přesměrování standardního a chybového výstupu
  - `myapp … 1>$SCRATCHDIR/stdout 2>$SCRATCHDIR/stderr`
- zjištění stavu lokální uživatelské kvóty a zabírajících souborů (prvotní informace emailem)
  - utilita `$ check-local-quota`
    spuštěno na předmětném uzlu

Neefektivní výpočty

Zajímejte se o efektivitu Vašich úloh

- požadavek na více jader nepromění jednoprocesorový/ sériový výpočet na paralelní (= nedojde ke zrychlení)
  - využíváno bude stále jediné CPU
- mnoho aplikací mění počet využívaných jader v průběhu výpočtu
  - větší počet jader může být využíván jen po krátkou dobu běhu aplikace

Sledování využití (nejen) CPU úlohou:

- *v průběhu běhu úlohy:*
  - na výpočetním uzlu (SSH) s využitím standardních nástrojů (`top`, `htop`, ...)
- *po ukončení úlohy:*
  - na portále v přehledu úloh (https://metavo.metacentrum.cz/cs/myaccount/myjobs.html) červené podbarvení neefektivních úloh

Infiniband

Distribuované úlohy mohou být neefektivní kvůli pomalému komunikačnímu kanálu

- komunikace skrze standardní síťové propojení (Ethernet) je pomalá
- **Infiniband** – specializované nízkolatenční propojení pro podporu rychlé komunikace distribuovaných úloh

Mnohé clustery NGI jsou vybaveny Infinibandem

- výrazně urychluje běh distribuovaných (MPI) úloh
  - dostupnost detekována automaticky
    vždy identické spuštění: `mpirun myapp`
  - v případě nedostupnosti je využit Ethernet
- *požadavek:*
  - $ qsub –l select=… **–l place=group=infiniband** script.sh

Mnoho krátkých úloh

Seskupujte příliš krátké úlohy

- např. v délce do jednotek minut
  - režie spuštění tvoří netriviální podíl doby běhu
    neefektivní využití zdrojů

V jedné úloze spusťte více instancí výpočtu

- *možnosti realizace:*
  - sériové spuštění instancí v rámci běhu jedné úlohy
    process data1
    process data2
    ...
  - paralelní spuštění instancí v rámci běhu jedné úlohy (nezbytná alokace dostatku CPU)
    - `pbsdsh`
    - `parallel`

Výpočty na čelních uzlech

Nepočítejte na čelních uzlech

- ať už pro výpočty nebo složitější analýzu výsledků
  - výrazné omezení přístupového uzlu (mnohdy vedoucí až k pádu)
- primárním posláním je příprava úloh a jednoduché/ krátkodobé operace

Využívejte interaktivní úlohy

- *požadavek:*
  - `$ qsub -I -l select=…`
- *možnosti práce:*
  - textový režim
  - grafický režim – VNC přístup
    $ module add gui
    $ gui start
    - viz https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Remote_desktop

Interaktivní úlohy

Minimalizujte prodlevy v interaktivních úlohách

- zejména čas mezi spuštěním úlohy a počátkem Vaší práce (spuštěním výpočtu)
  - -> neefektivní využívání zdrojů

Nechte se informovat o spuštění úlohy

- *požadavek:*
  - `$ qsub -m ab -I -l select=…`
    zašle Vám email při spuštění úlohy
    - („`-m abe`" i při jejím ukončení)
- přepínač lze využít i při dávkových úlohách

  pozor při spouštění většího množství úloh!
  - zahlcení Vaší schránky
  - blacklist mailového serveru ☺

Cloudové stroje

Udržujte si přehled o Vámi spuštěných virtuálních strojích

- i Vámi nevyužívaný stroj využívá zdroje infrastruktury
  - -> plýtvání zdroji, které může efektivněji využít někdo jiný

Ukončujte/suspendujte nepoužívané VM

- připravujeme nasazení systému, který Vám bude běžící VM pravidelně (cca každé 3 měsíce) připomínat

  a v případě nereakce (= aktivního prodloužení) tyto suspenduje

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- **What to do if something goes wrong?**

- Real-world examples

What to do if something goes wrong?

1. check the MetaVO/CERIT-SC documentation, application module documentation
   - whether you use the things correctly
2. check, whether there haven't been any infrastructure updates performed
   - visit the webpage http://metavo.metacentrum.cz/cs/news/news.jsp
     - one may stay informed via an RSS feed
3. write an email to meta@cesnet.cz, resp. support@cerit-sc.cz
   - your email will create a ticket in our Request Tracking system
     - identified by a unique number → one can easily monitor the problem solving process
   - please, include **as good problem description as possible**
     - problematic job's JOBID, startup script, problem symptoms, etc.

Overview

- Brief MetaCentrum introduction
- Brief CERIT-SC Centre introduction

- Grid infrastructure overview
- How to … specify requested resources
- How to … run an interactive job
- How to … use application modules
- How to … run a batch job
- How to … determine a job state
- How to … run a parallel/distributed computation
- Another mini-HowTos …
- What to do if something goes wrong?

- **Real-world examples**

Real-world examples

Examples:

- Maple
- Gaussian + Gaussian Linda
- Gromacs (CPU + GPU)
- Matlab (parallel & distributed & GPU)
- Ansys CFX + OpenFoam
- Echo
- MrBayes
- Scilab
- R – Rmpi

- demo sources:

`/storage/brno2/home/jeronimo/MetaSeminar/latest`

command: `cp -r /storage/brno2/home/jeronimo/MetaSeminar/latest $HOME`

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.*

www.cesnet.cz www.metacentrum.cz www.cerit-sc.cz