

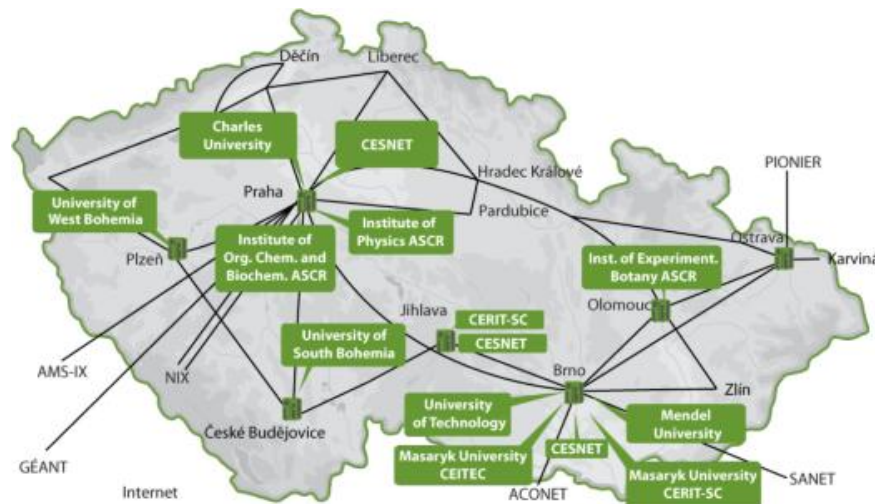
Národní gridová infrastruktura MetaCentrum & související služby pro akademickou obec

Tomáš Rebok

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

MetaCentrum @ CESNET

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



Výpočetní cluster

- skupina vzájemně propojených „běžných“ počítačů



(dříve 😊)

Výpočetní cluster

- skupina vzájemně propojených „běžných“ počítačů



(dnes)

MetaCentrum NGI

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

- komerční subjekty pouze pro veřejný výzkum

- **nabízí:**

<http://metavo.metacentrum.cz>

- **výpočetní zdroje**
- **úložné kapacity**
- **aplikační programy**

- **po registraci k dispozici zcela zdarma**

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

- prioritizace uživatelů při plném vytížení zdrojů



NGI – základní charakteristika

- **po registraci zdroje dostupné bez administrativní zátěže**
 - → ~ okamžitě (dle aktuálního vytížení)
 - **žádné žádosti o zdroje**
 - **každoroční prodlužování uživatelských účtů**
 - periodická informace o **trvajících 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**
-

NGI – dostupný výpočetní hardware

- **výpočetní zdroje: cca 10000 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
 - další „exotický“ hardware:
 - uzly s GPU kartami, SSD disky, ...



NGI – dostupný úložný hardware

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

- úložiště 3x v Brně, 1x v Plzni, 1x v ČB, 1x v Praze, 1x v Jihlavě,
1x v Ostravě

- uživatelská kvóta **1-3 TB na každém z úložišť**

- **cca 22 PB pro dlouhodobá/archivní data**

- (HSM – MAID, páskové knihovny)

- „neomezená“ uživatelská kvóta

NGI – dostupný software

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

NGI – výpočetní prostředí

- **dávkové úlohy**

- popisný skript úlohy
- oznámení startu a ukončení úlohy

- **interaktivní úlohy**

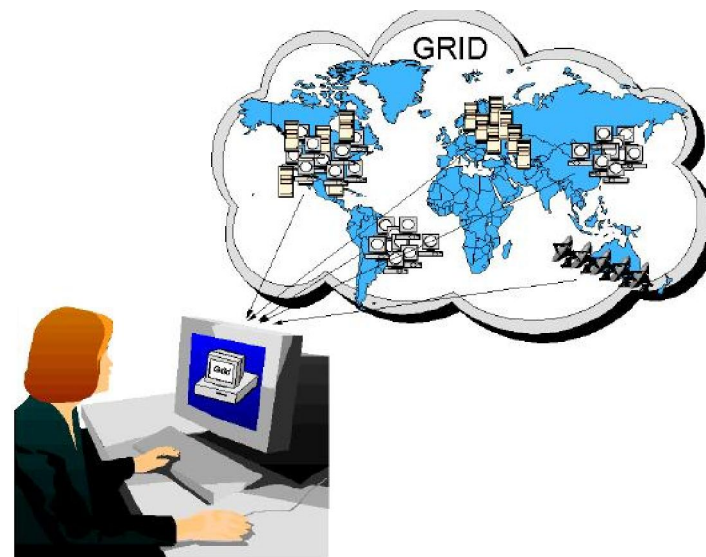
- textový i grafický režim

- **cloudové rozhraní**

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

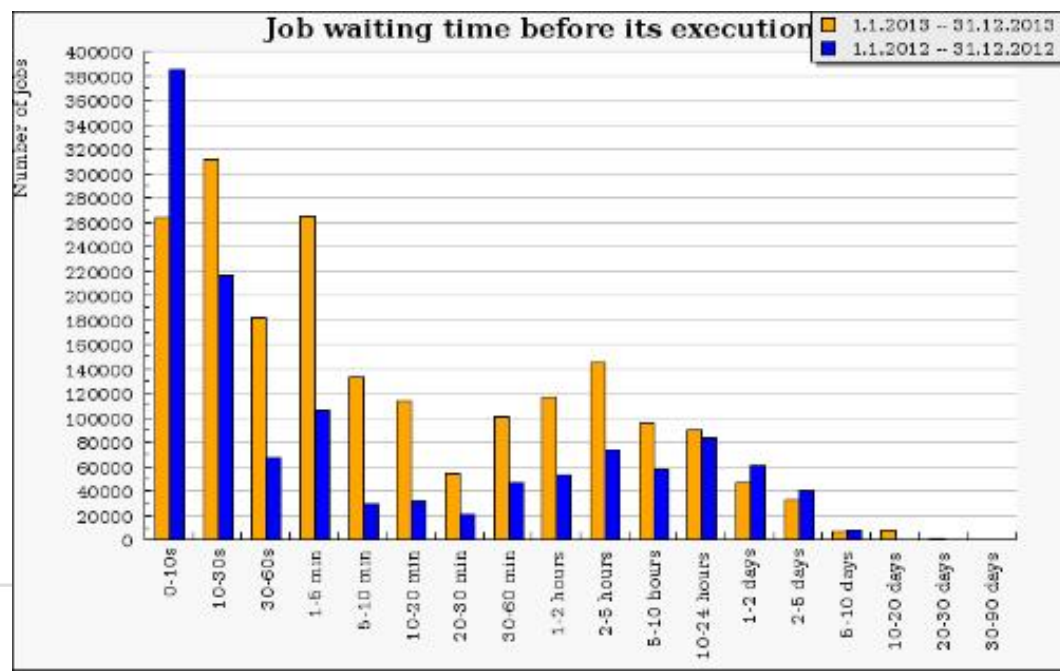
opět zaměřeno na vědecké výpočty

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

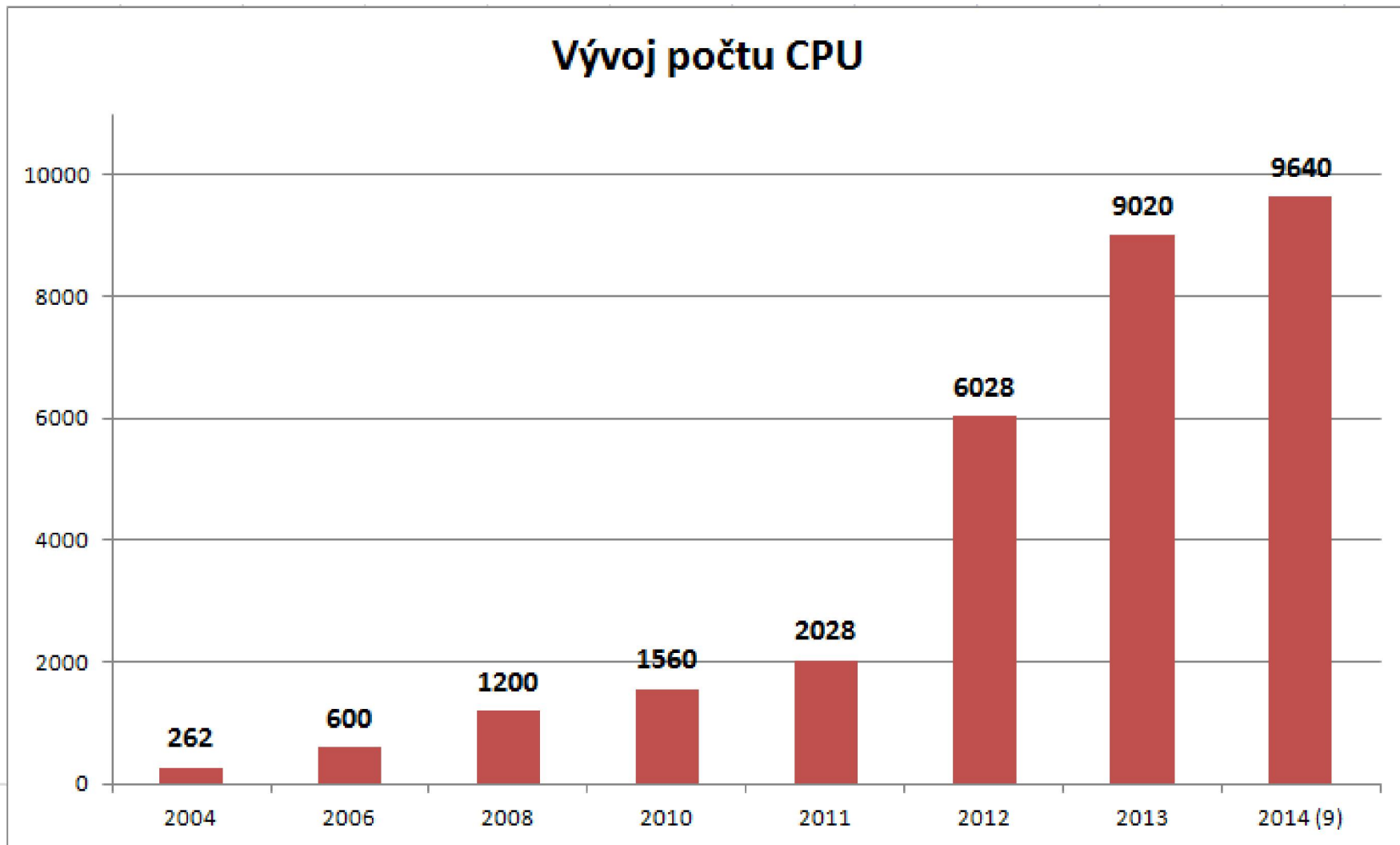


NGI v číslech...

- *cca 10000 jader, cca 580 uzlů*
- *za rok 2013:*
 - *761 uživatelů (k 31.12.2013)*
 - *cca 1,9 mil. spuštěných úloh*
 - *cca 5200 úloh denně*
 - *propočítáno*
cca 4,4 tis. CPUlet
 - *cca 39 mil. CPUhodin*

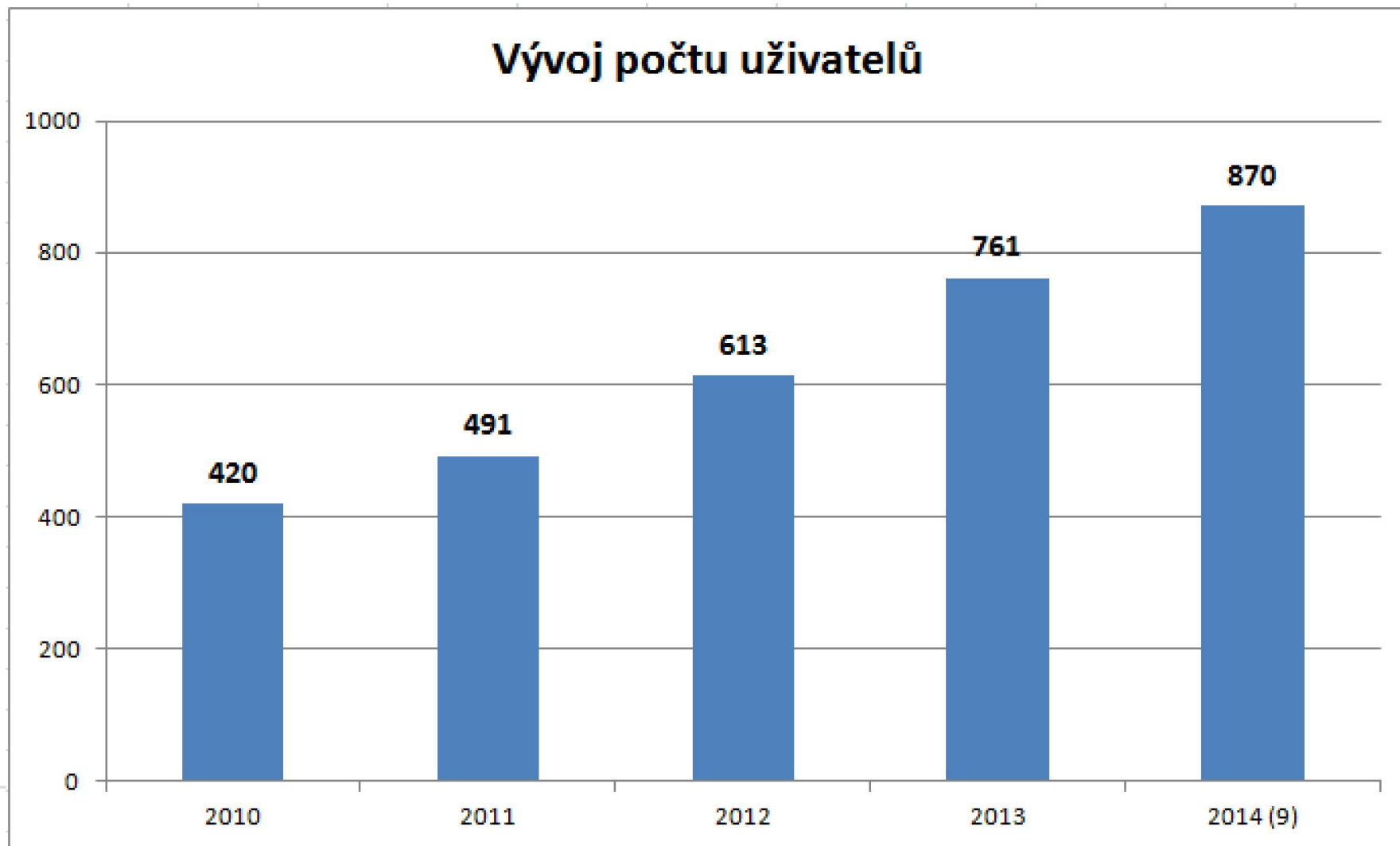


... a grafech

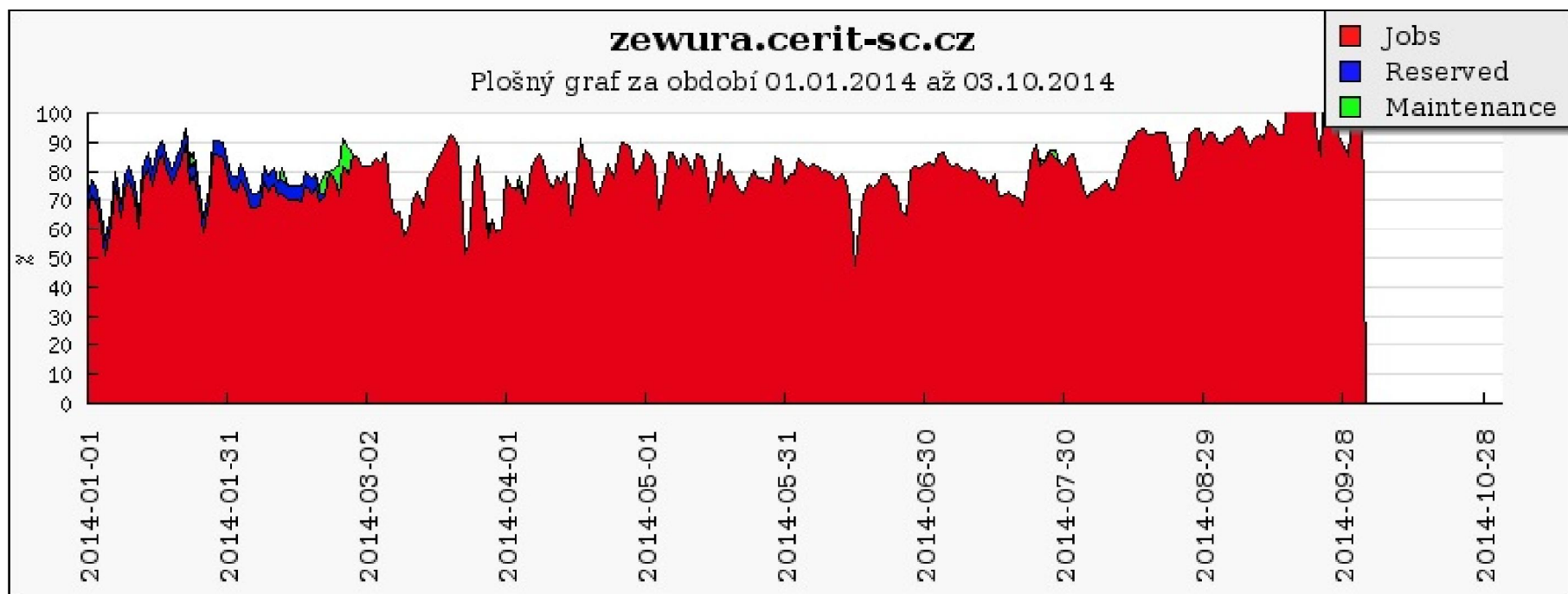


... a grafech

Vývoj počtu uživatelů

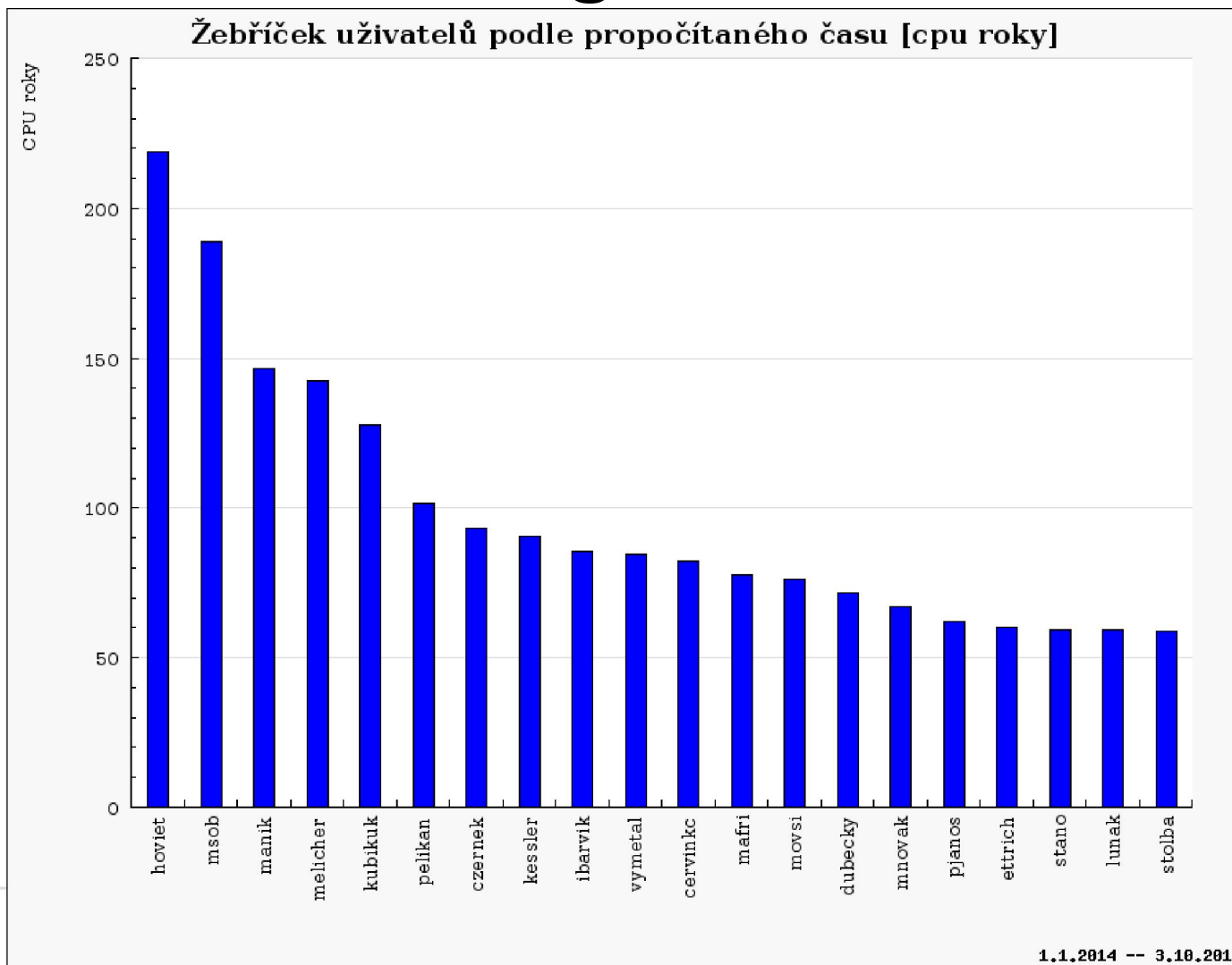


... a grafech



Vytížení vybraného clusteru (zewura.cerit-sc.cz): 1.1.2014 – 3.10.2014

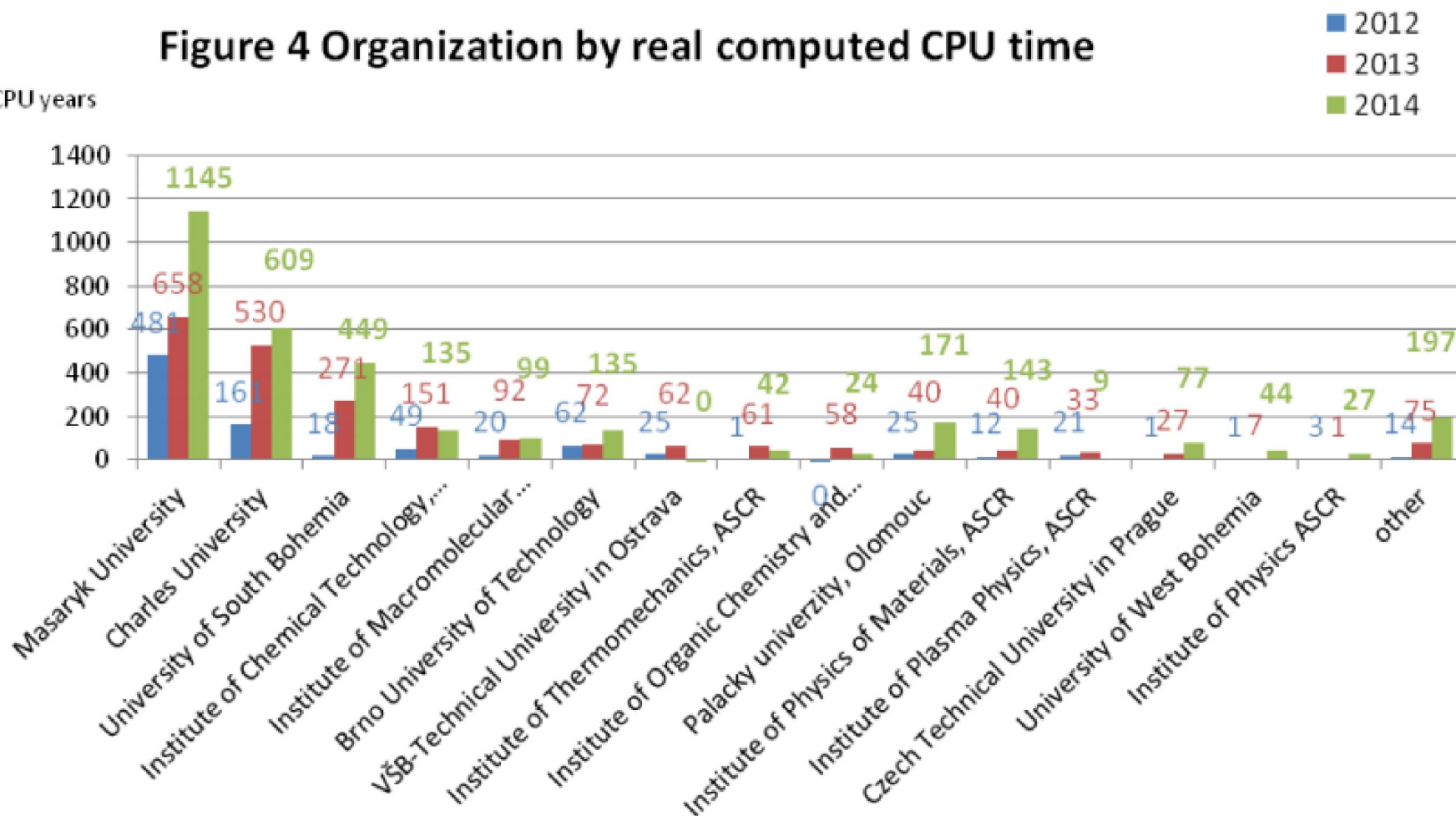
... a grafech



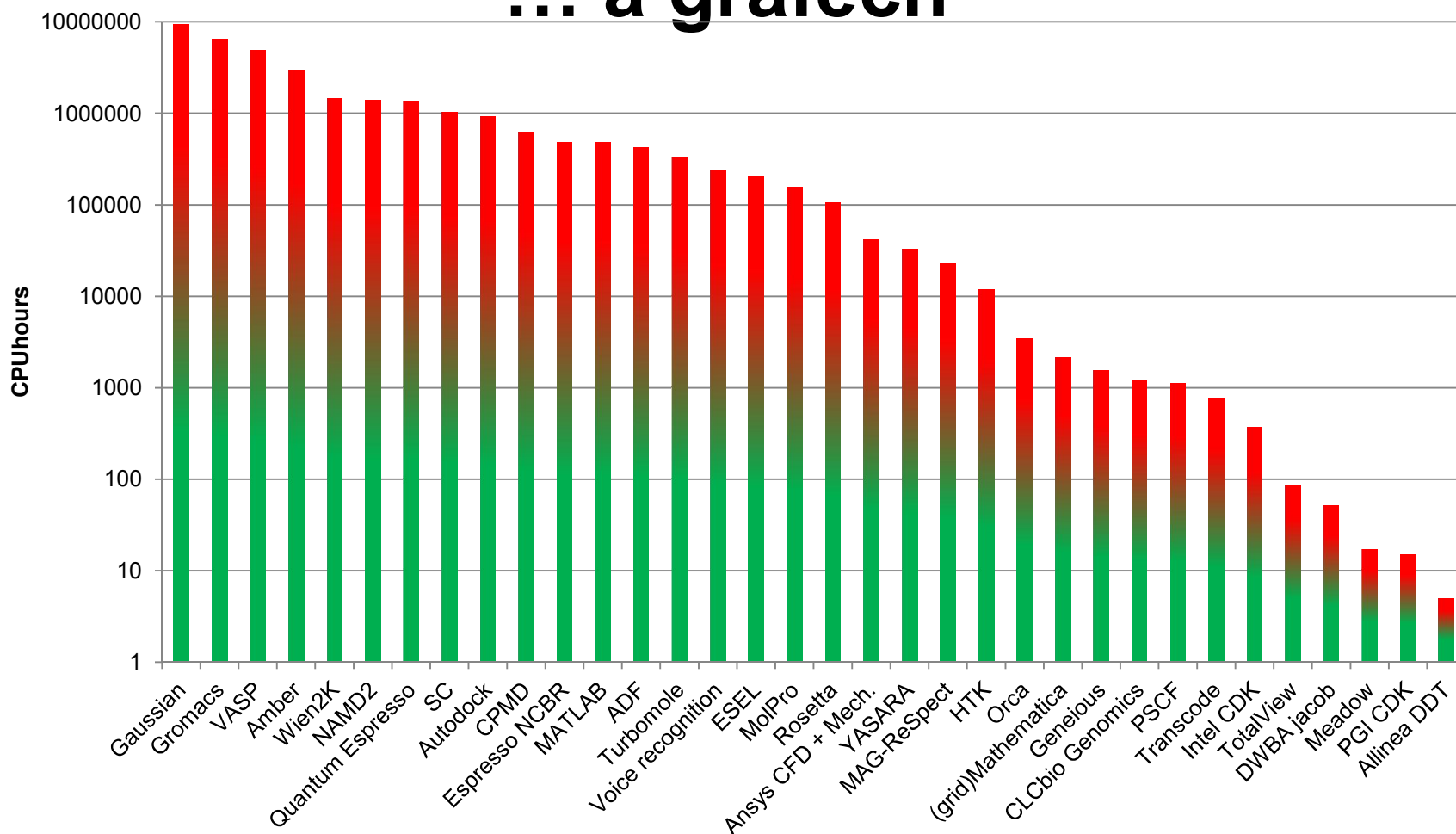
... a grafech

Figure 4 Organization by real computed CPU time

CPU years

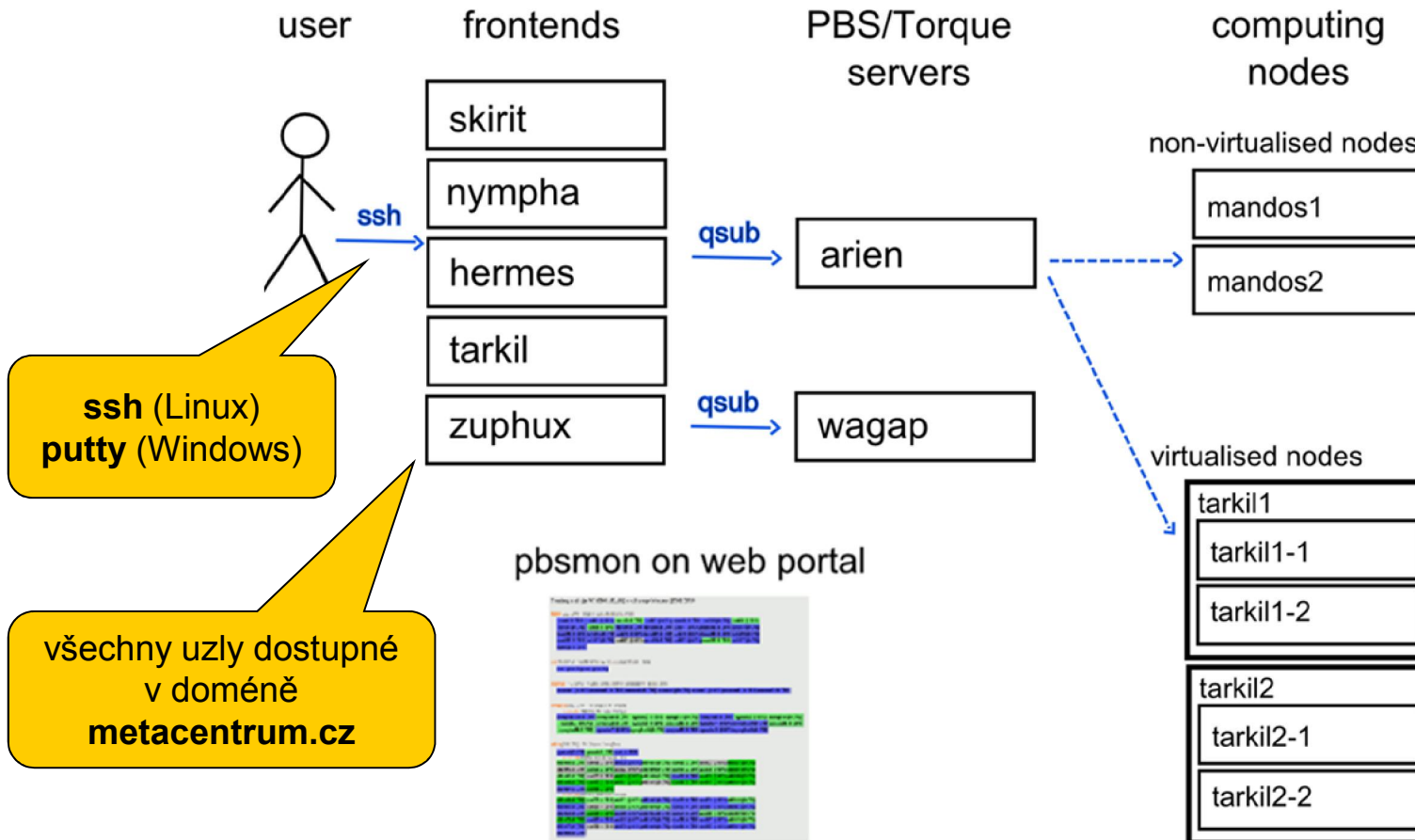


... a grafech



aplikace podle propočítaného času (2011-2014)

NGI pod pokličkou I.



NGI pod pokličkou II.

- **operační systém: Debian 7**
 - správa systému: **Puppet**
 - monitoring systému: **Icinga (Nagios) + Pakiti** (záplaty)
 - centralizované logování a systém pro prohledávání logů: **Kibana/ElasticSearch**
 - **otevřený systém** → minimalizace zátěže pro uživatele
- **masivní využití virtualizace: XEN, KVM**
 - prioritizace, „přelívání“ zdrojů NGI ↔ cloud
- **systém pro zadávání a plánování úloh: Torque**
 - dlouhodobý vlastní vývoj, nová větev
 - významné rozšíření funkcionality, kooperace plánovačů
 - nové plánovací algoritmy (**rozvrhové plánování**)
- **sdílení diskových polí: NFSv4 / Kerberos**



NGI pod pokličkou III.

- **správa aplikací: Environment modules**
 - systém v základní konf., centralizované úložiště aplikací (**AFS**)
- **portálové služby: PBSmon**
 - vlastní produkt
 - monitoring využití uzlů a diskových kapacit, informace o úlohách, plánovací rozvrhy, statistiky, ...
- **správa identit uživatelů: Perun**
 - vlastní produkt, nasazováno v mezinárodních infrastrukturách
 - webový systém: správa skupin, konfigurace služeb, ...
- **autentizační systém: Kerberos, certifikáty**
 - jediné jméno/heslo do všech služeb (SSH, portál, wiki, ...)
- **mnoho doplňkových, převážně vlastních nástrojů**

NGI – 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 se základními postupy***

- <http://metavo.metacentrum.cz> , sekce „Dokumentace“

- ***počítejte 😊***

e-infrastruktura CESNET: doplňkové služby

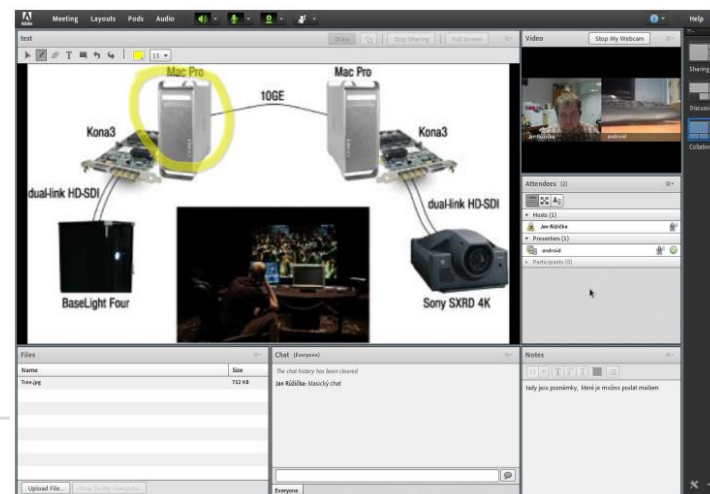
e-infrastruktura CESNET – další služby I.

• Úložné služby:

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

• Podpora vzdálené spolupráce

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



e-infrastruktura CESNET – další služby II.

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

Služby pro podporu vědy a výzkumu

Centrum CERIT-SC

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



■ CERIT-SC – cíle Centra

Hlavní cíle Centra:

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

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

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

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

CERIT-SC – 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 spolupracujících 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, Thalamos, 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
 - plánování na gridech, GPU výpočty, správa identit uživatelů, ...
- **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 – zázemí

Snaha o maximální zapojení studentů:

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

Silné odborné zázemí:

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

Kolaborativní výzkum

Rekonstrukce stromů I.

Rekonstrukce individuálních stromů z laserových skenů

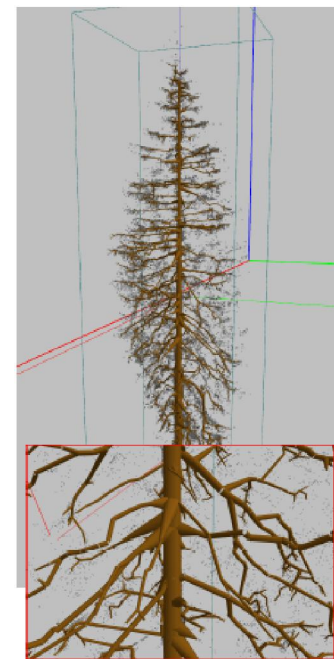
- **partner:** *Centrum výzkumu globální změny AV ČR (CzechGlobe)*
- **cíl projektu:** návrh algoritmu pro rekonstrukci 3D modelů stromů
 - z mraku nasnímaných 3D bodů
 - strom nasnímán laserovým snímačem LiDAR
 - výstupem jsou souřadnice XYZ + intenzita odrazu
 - *očekávaný výstup:* 3D struktura popisující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



Rekonstrukce stromů II.

Rekonstrukce individuálních stromů laserového skenu – cont'd

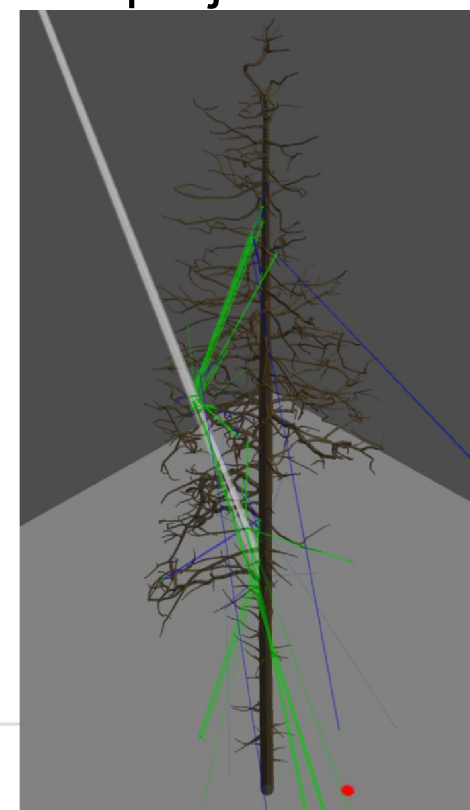
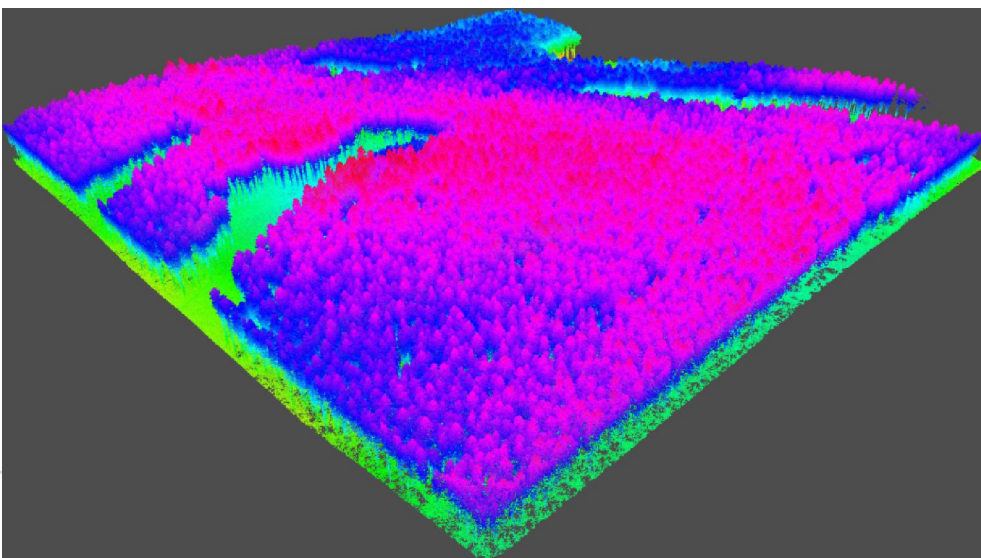
- v rámci DP navržena *inovativní metoda* rekonstrukce 3D modelů smrkových stromů
- rekonstruované modely využity v návazném výzkumu
 - získávání statistických informací o množství dřevité biomasy a o základní struktuře stromů
 - parametrizované opatřování zelenou biomasou (mladé větve + jehličky) –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



■ Rekonstrukce lesů I.

Rekonstrukce lesních porostů z full-wave LiDAR skenů

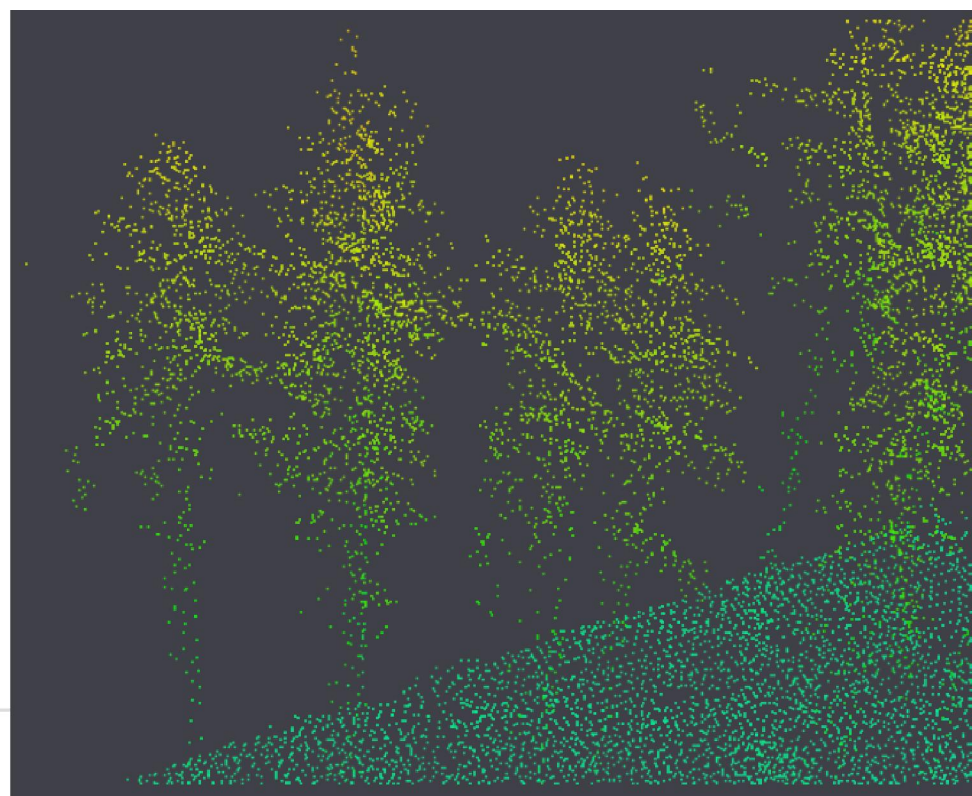
- „s jídlem roste chut“ 😊
- návazná PhD práce, příprava budoucího společného projektu
- **cíl: co nejvěrnější 3D rekonstrukce celých lesních porostů z leteckých full-wave LiDARových skenů**
 - možné využití hyperspektrálních skenů, termálních skenů, in-situ měření, ...



■ 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**



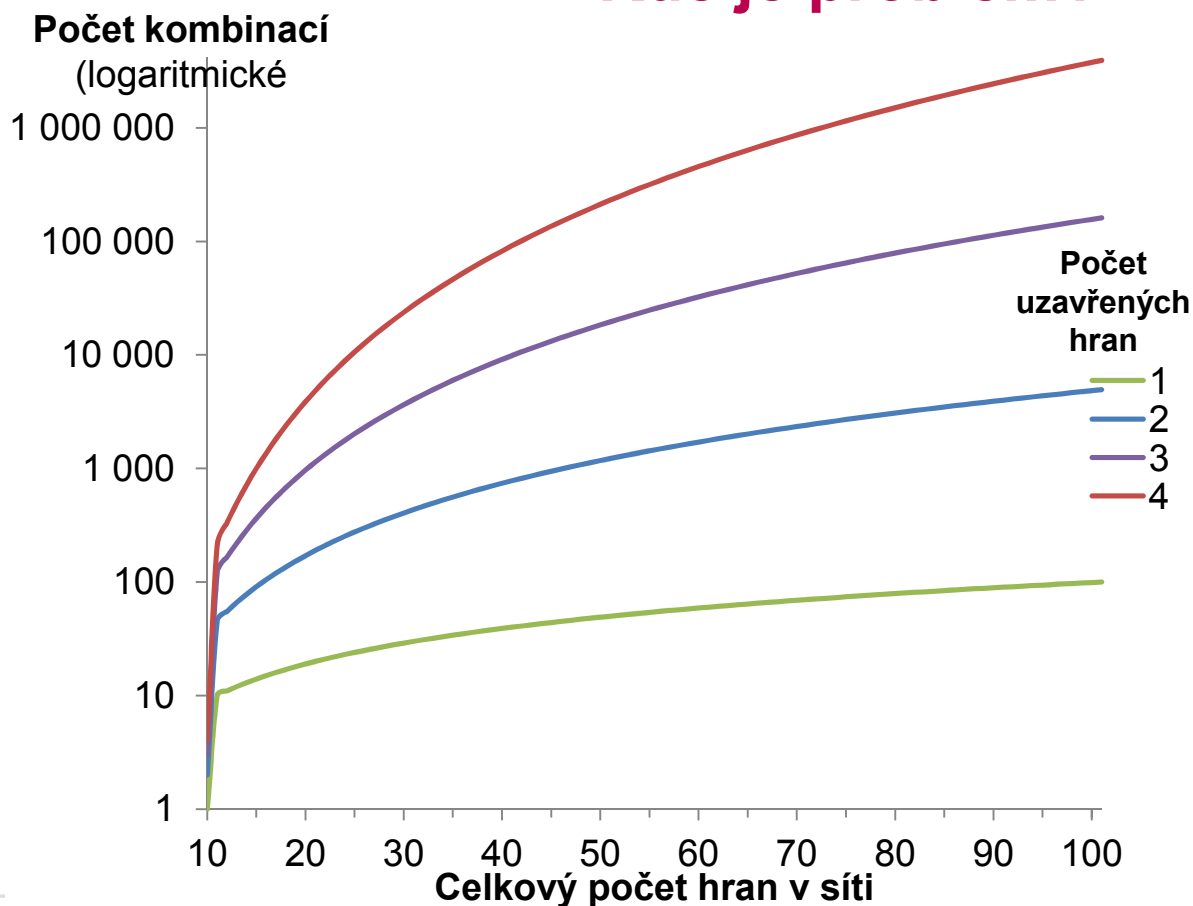
Identifikace problémových uzavírek I.

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?



Sít' Zlínského kraje

724 uzlů

974 hran

1. 974

2. 473 851

3. 153 527 724

4. 37 268 855 001

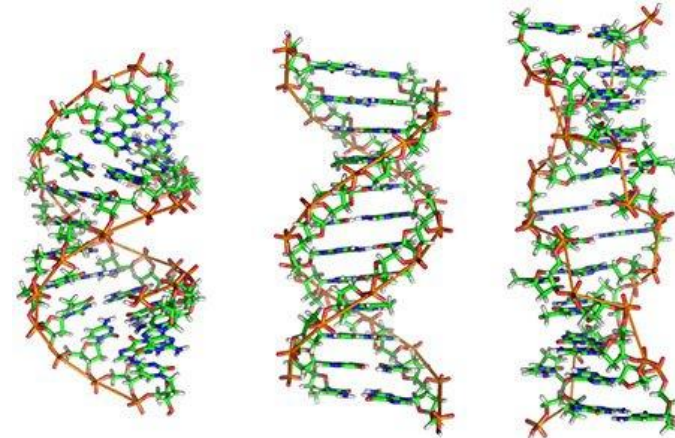
5. 7 230 157 870 194

...

Korekce chyb a skládání genomu

Sekvenování *Trifolium pratense* (Jetel luční)

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



Fotometrický archiv astronomických snímků

Fotometrický archiv astronomických snímků

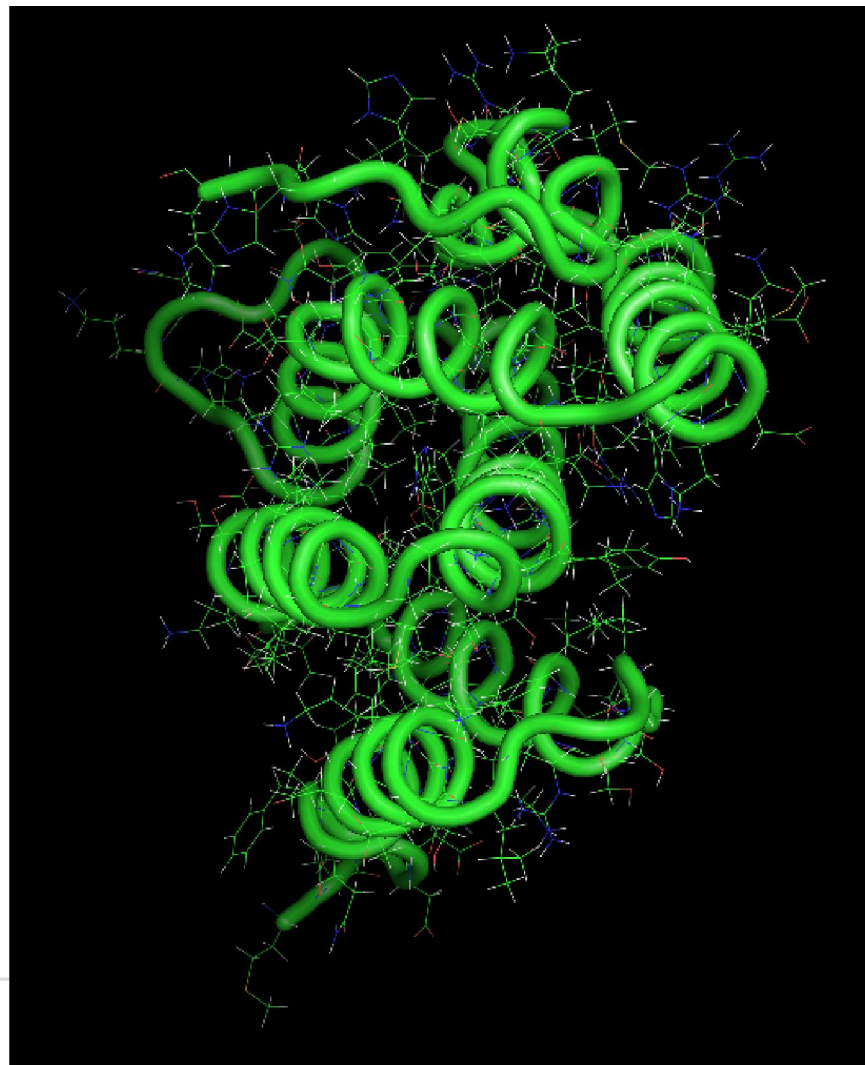
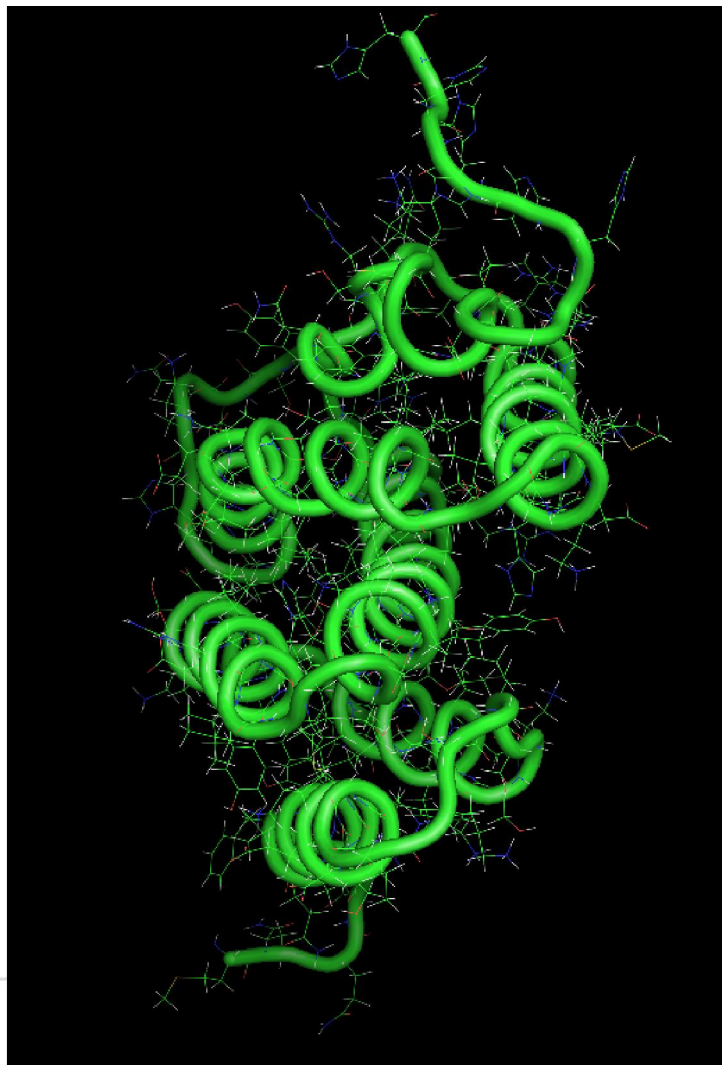
- **partner:** *Ústav teoretické fyziky a astrofyziky PŘF MU*
- **cíl projektu:** vytvoření a provoz portálu pro získávání dat o světelnosti proměnných hvězd (projekt SuperWASP)
 - databáze cca 18 miliónů hvězd
- **dosažené výsledky:**
 - portál v produkčním režimu: <http://wasp.cerit-sc.cz>
 - rozšířen 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.

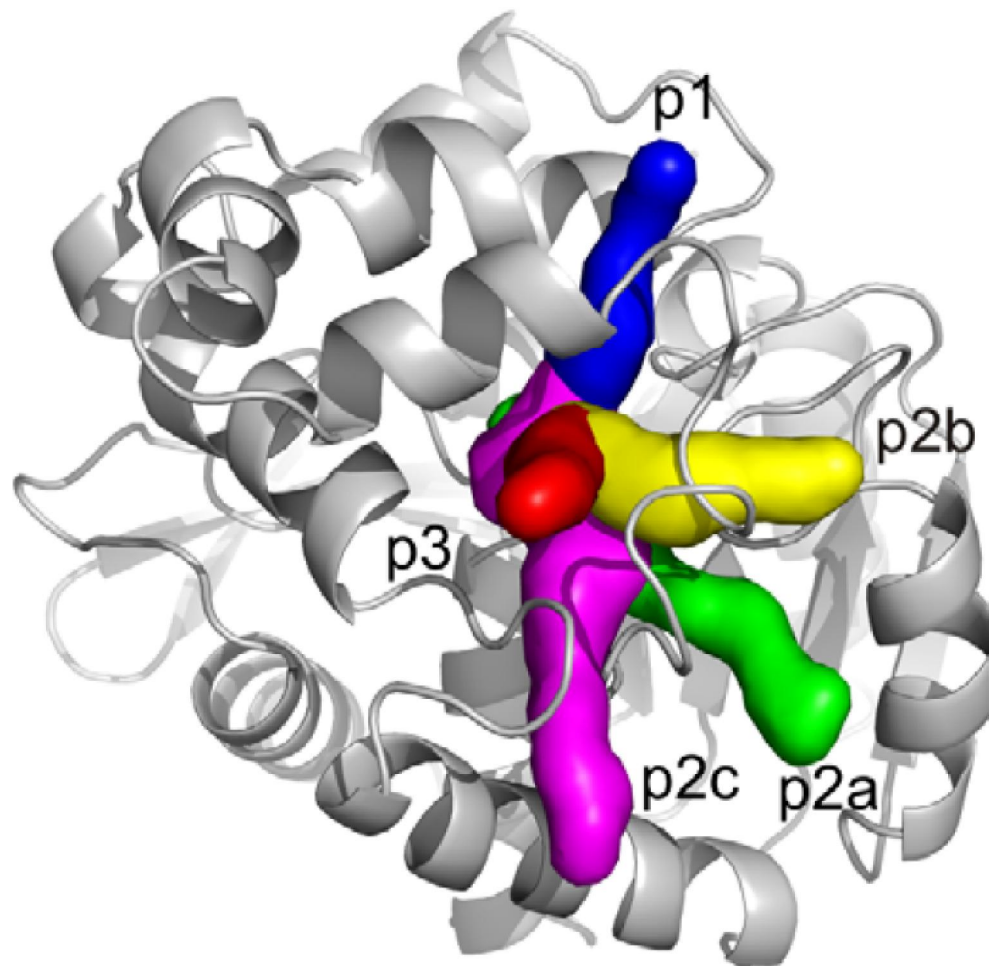


Výpočetní chemie a biochemie III.

Analýza transportních cest v proteinech

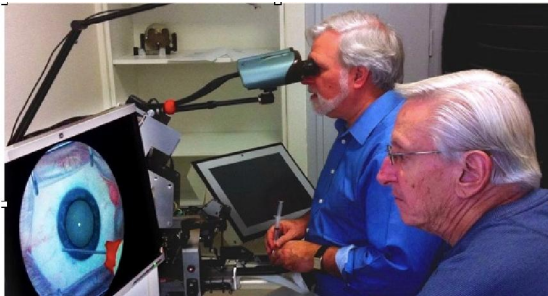
- partner: *Loschmidt Laboratories MU*
- cíl projektu: analýza možností transportu molekul ligandu (např. léčivo) na aktivní místa proteinů
 - tj. zajištění nejen kýženého účinku molekuly na protein, ale zejména ověření možností transportu této molekuly k aktivním místům proteinů
 - v současné době jsou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

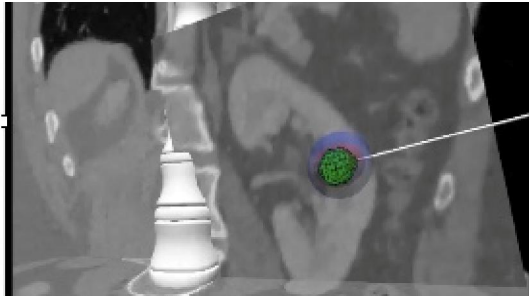


Modelování měkkých tkání v reálném čase I.

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



Simulátor operace kataraktu
MSICS



Kryoablace: plánování
umístění elektrody



Laparoskopie: vizualizace
vnitřních struktur

Chirurgické trenažéry

Pre-operativní plánování

Navigace během operace

2010

2014

2018

Simulace vyžadují kombinaci různých reprezentací objektů:

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

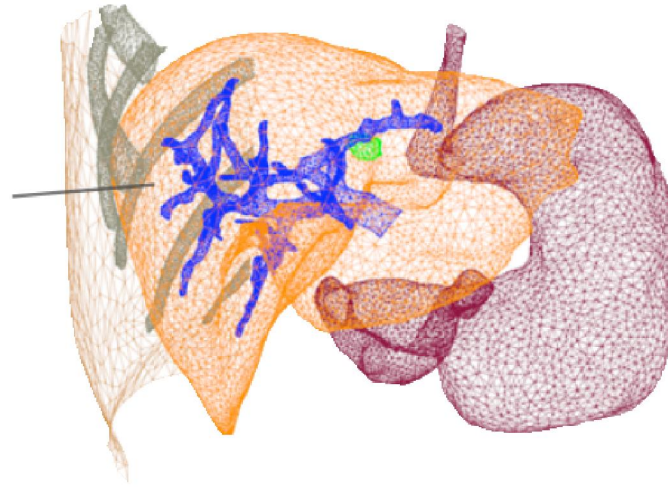
Modelování měkkých tkání v reálném čase II.

Nasazení v lékařské praxi

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

Modelování interakcí

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



Numerické metody řešení

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

Mechanické a fyzikální modelování

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

Validace a verifikace modelů

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

- **mezinárodní spolupráce** s instituty (IHU Strasbourg, INRIA France) a univerzitami (University of British Columbia, Koç University, Istanbul)
- **příprava evropského H2020 projektu**

Další spolupráce ...

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

Závěr

- **Národní gridová infrastruktura MetaCentrum:**

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

- **Centrum CERIT-SC:**

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



Pozvánka: Seminář uživatelů Národní gridové infrastruktury
2. prosince 2014, Masarykova kolej ČVUT, Thákurova 1, Praha