

Služby Národní Gridové Infrastruktury MetaCentrum & Centra CERIT-SC

Tomáš Rebok

MetaCentrum, CESNET z.s.p.o.

CERIT-SC, Masarykova univerzita v Brně

(rebok@ics.muni.cz)

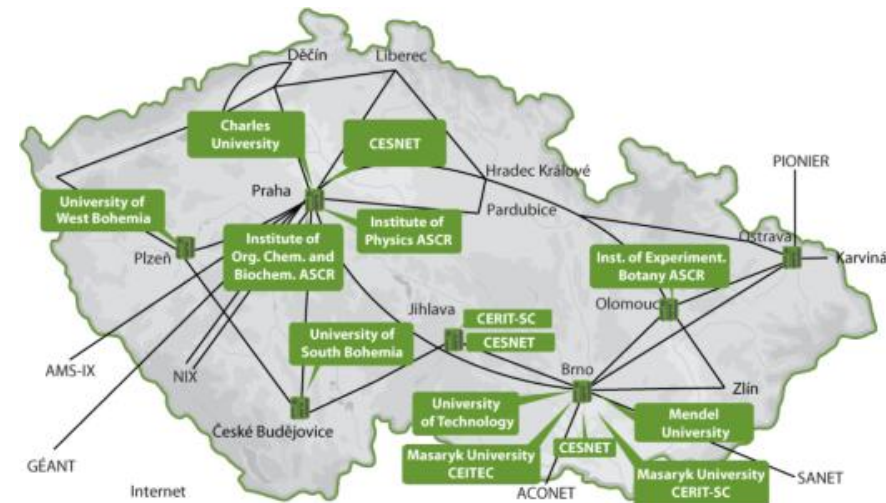
Národní Gridová Infrastruktura (NGI)

- od roku 1996 **koordinovaná aktivitou sdružení CESNET (MetaCentrum)**

– NGI integruje velká/střední HW centra (clustery, výkonné servery a úložiště) několika univerzit/organizací v rámci ČR

→ prostředí pro (spolu)práci v oblasti výpočtů a práce s daty

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



<http://www.metacentrum.cz>

Virtuální organizace MetaCentrum (Meta VO)

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

- komerční subjekty také, ale pouze pro veřejný výzkum

- **nabízí:**

<http://metavo.metacentrum.cz>

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

- **po registraci k dispozici zcela zdarma**

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

- prioritizace uživatelů při vytížených zdrojích

- dobrovolné (lze počítat i bez „děkovaček“), avšak vhodné



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 **trvajícím akademické příslušnosti uživatelů**
 - využití infrastruktury eduID.cz pro minimalizaci zátěže uživatele
 - **oznamování publikací s poděkováním MetaCentru/CERIT-SC**
 - doklad pro žádosti o budoucí financování z veřejných zdrojů
- **best-effort služba**

Meta VO – dostupný výpočetní hardware I.

- **výpočetní zdroje: cca 10000 výpočetních jader (x86_64)**
 - uzly s nižším počtem výkonných jader: 2x4-8 jader
 - uzly se středním počtem jader (SMP stroje): 32-80 jader
 - paměť až 1 TB na uzel
 - další „exotický“ hardware:
 - uzly s GPU kartami, SSD disky, ...
 - a zejména ...

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

Meta VO – dostupný výpočetní hardware II.

- **SGI UV 2000**
 - 288 jader
 - 48x 6-core Intel Xeon E5-4617 2.9GHz
 - 6 TB operační paměti
 - 72 TB scratch



Meta VO – dostupný úložný hardware

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

- centralizovaná úložiště rozmístěná ve vybraných městech ČR

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

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

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

- (HSM – MAID, páskové knihovny)

- „neomezená“ uživatelská kvóta

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

Meta VO – dostupný software

- **~ 300 různých aplikací** (doplňováno na požádání)
 - viz <http://meta.cesnet.cz/wiki/Kategorie:Aplikace>
- **průběžně udržované vývojové prostředí**
 - GNU, Intel, PGI, ladící a optimalizační nástroje (TotalView, Allinea), ...
- **generický matematický software**
 - Matlab, Maple, Mathematica, gridMathematica, ...
- **komerční i volný software pro aplikační chemii**
 - Gaussian 09, Gaussian-Linda, Gamess, Gromacs, Amber...
- **materiálové simulace**
 - **25x Ansys CFD** (Fluent + CFX), **5x Ansys Mechanical**, **60x Ansys HPC**, ...
- **strukturní biologie, bioinformatika**
 - CLC Genomics Workbench, Geneious, Turbomole, Molpro...
 - řada volně dostupných balíčků

Meta VO – výpočetní prostředí

- **dávkové úlohy**

- popisný skript úlohy
- oznámení startu a ukončení úlohy

- **interaktivní úlohy**

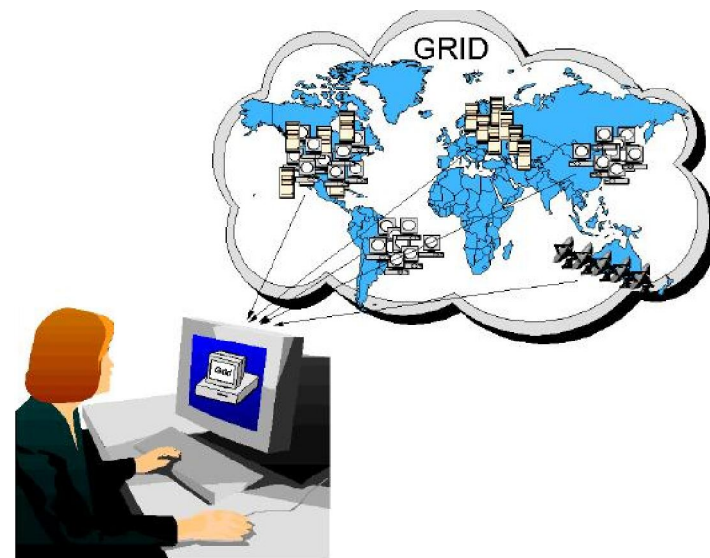
- textový i grafický režim

- **cloudové rozhraní**

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

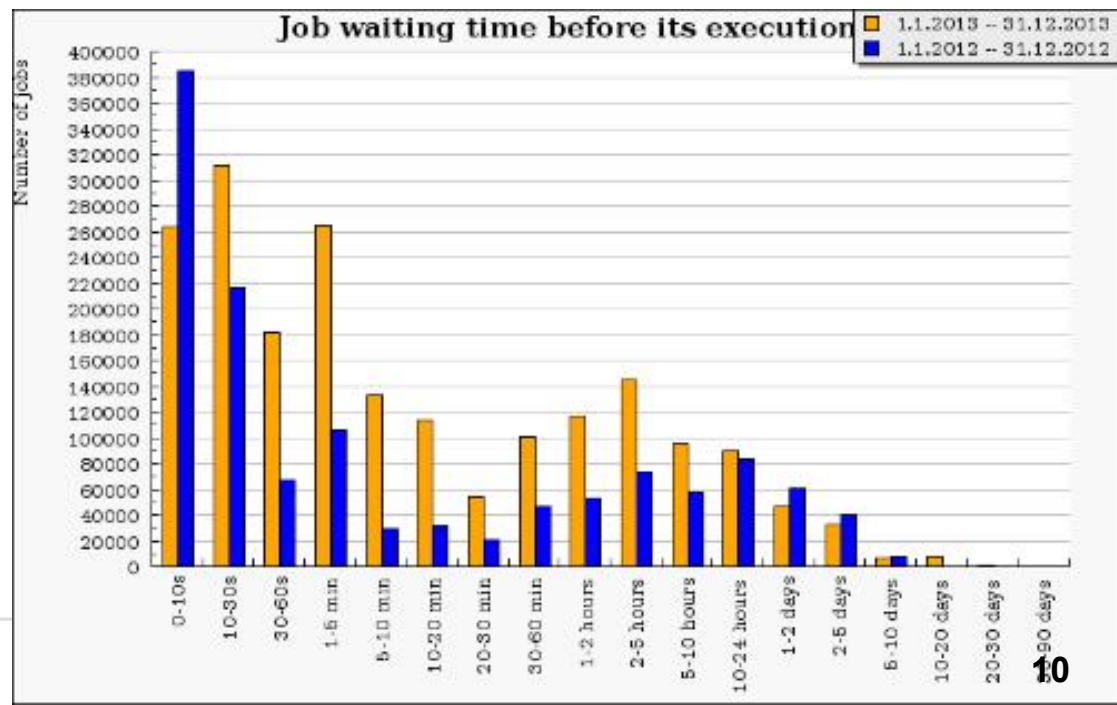
opět zaměřeno na vědecké výpočty

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



Meta VO 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*



Centrum CERIT-SC

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



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

CERIT-SC – cíle Centra

Hlavní cíle Centra:

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

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

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

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

CERIT-SC – kolaborativní výzkum

Spolupráce a podpora výzkumu formou:

- vedení DP a PhD prací studentů FI MU
- participace na národních/evropských projektech
 - EGI InSPIRE, ELIXIR, ICOS, **H2020 projekty**...
 - zapojení **především kmenových zaměstnanců**

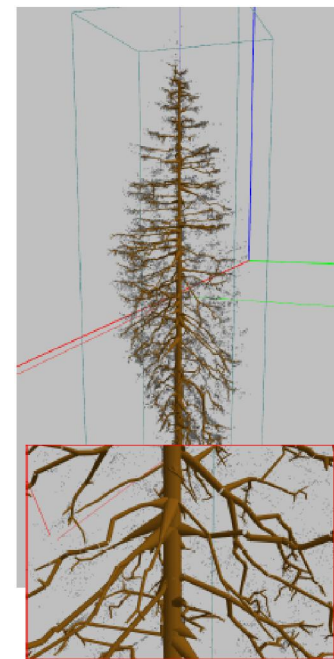
Silné odborné zázemí:

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

Příklady spolupráce s partnery I.

Rekonstrukce stromu z jeho laserového skenu

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



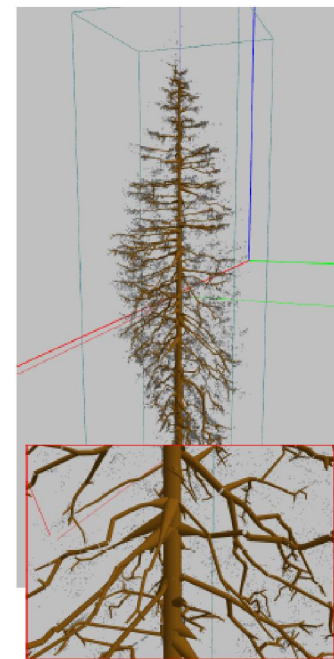
Příklady spolupráce s partnery I.

Rekonstrukce stromu z jeho laserového skenu – cont'd

- v rámci DP navržena *inovativní metoda* rekonstrukce 3D modelů smrkových stromů

- rekonstruované modely využity v návazném výzkumu

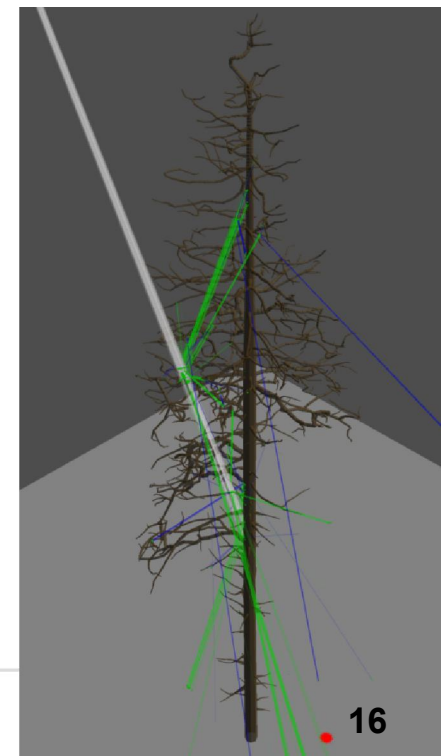
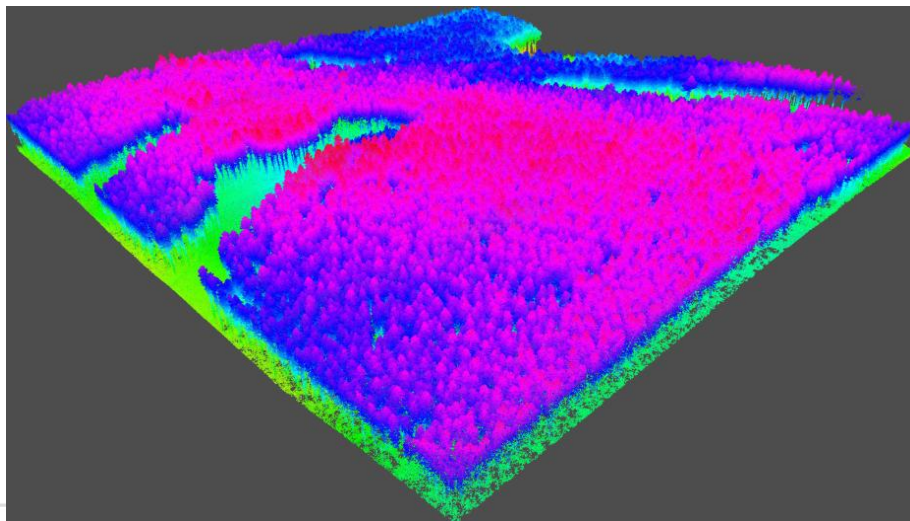
- získávání statistických informací o množství dřevité biomasy a o základní struktuře stromů
- parametrizované opatřování zelenou biomasou (mladé větve + jehličky) – součást PhD práce
- importování modelů do nástrojů umožňujících analýzu šíření slunečního záření s využitím DART modelů



Příklady spolupráce s partnery II.

Rekonstrukce lesních porostů z full-wave LiDAR skenů

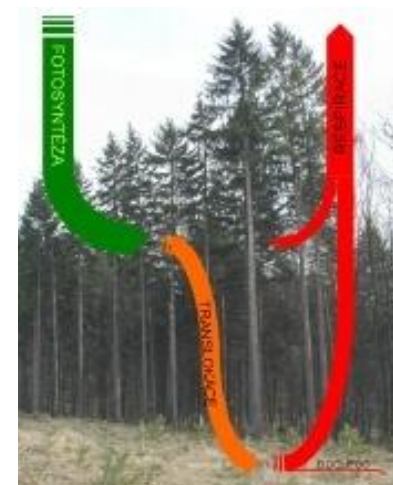
- probíhající téma PhD práce, příprava společného projektu
- **cíl: co nejdokladnější 3D rekonstrukce celých lesních porostů z leteckých full-wave LiDARových skenů**
 - možné využití hyperspektrálních skenů, termálních skenů, in-situ měření, ...



Příklady spolupráce s partnery III.

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

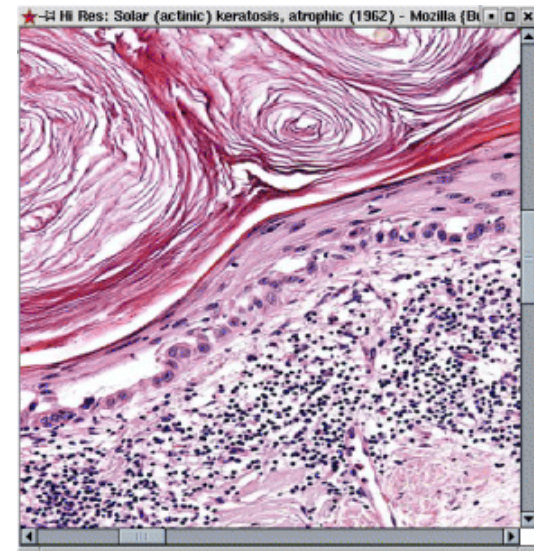
- partner: *CzechGlobe* (prof. Marek, dr. Pavelka)
- **cíl projektu: nalezení nové, plně automatické metody pro doplňování chybějících měření**
 - formou učení na historických datech
 - *doprovodné charakteristiky* – teplota, tlak, vlhkost, ...
- **hlavní problémy:**
 - nutnost brát v úvahu i historická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



Příklady spolupráce s partnery IV.

■ Virtuální mikroskop, patologické atlasy

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



Příklady spolupráce s partnery V.

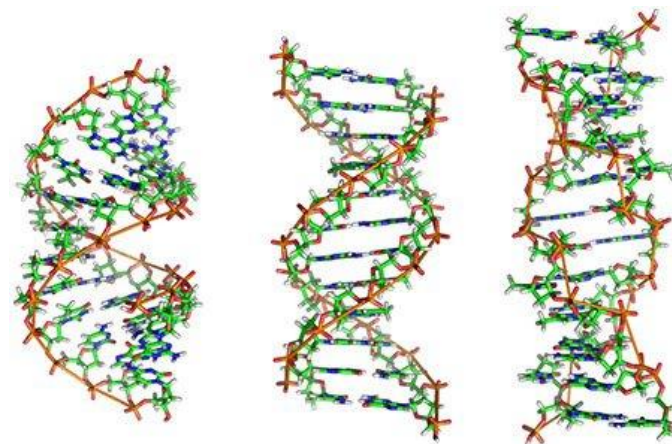
Hledání problematických uzavírek v silniční síti ČR

- partner: *Centrum Dopravního Výzkumu v.v.i., Olomouc*
(dr. Bíl, dr. Vodák)
- **cíl projektu: nalezení metody pro identifikaci problémových uzavírek v silniční síti ČR (aktuálně Zlínského kraje)**
 - Identifikace uzavírek vedoucích (dle definovaných ohodnocovacích funkcí) k problémům v dopravě
 - převedený problém: nalezení všech rozpadů grafu
 - v rámci DP navrženy dva inovativní (inteligentní) algoritmy, významně zrychlující proces výpočtu
- **hlavní problémy: výpočetní náročnost (NP-těžký problém)**

Příklady spolupráce s partnery VI.

Sekvenování *Trifolium pratense* (Jetel luční)

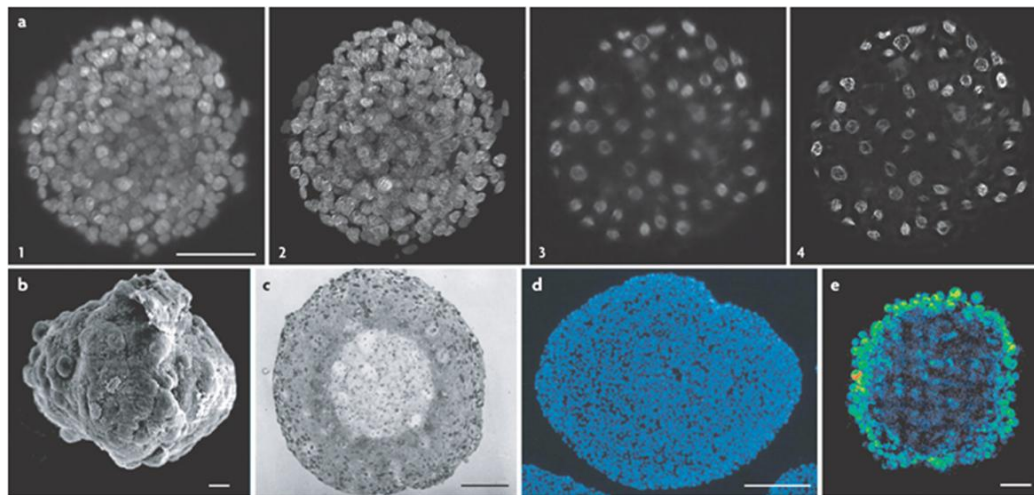
- partner: Ústav experimentální biologie PŘF MU
- cíl: optimalizace dostupných nástrojů pro skládání a opravy chyb v DNA kódech
 - *analýzy DNA (nejen) jetele vedou k výpočetně náročným problémům*
 - ~ 500 GB paměti
 - optimalizováno na cca 15% využití
 - výpočet trvá týdny/měsíce
- hlavní problém: výpočetní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



Příklady spolupráce s partnery VII.

Segmentace živých buněčných kultur v mikroskopických snímcích

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



■ Příklady spolupráce s partnery VIII.

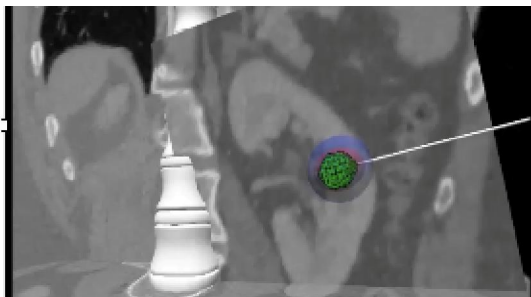
- **Biobanka klinických vzorků (BBMRI_CZ)**
 - *partner: Masarykův onkologický ústav, Recamo*
- **Modely šíření epileptického záchvatu a dalších dějů v mozku**
 - *partner: LF MU, ÚPT AV, CEITEC*
- **Fotometrický archív astronomických snímků**
- **Extrakce fotometrických údajů o objektech z astronomických snímků**
 - *2x partner: Ústav teoretické fyziky a astrofyziky PŘF MU*
- **Bioinformatická analýza dat z hmotnostního spektrometru**
 - *partner: Ústav experimentální biologie PŘF MU*
- **Optimalizace Ansys výpočtu proudění čtyřstupňovou, dvouhřídelovou plynovou turbínou s chlazením lopatek**
 - *partner: SVS FEM*
- **3.5 miliónu „smartmeterů“ v cloudu**
 - *partner: Skupina ČEZ, MycroftMind*
- ...

Aktuálně ustavovaná spolupráce: Modelování měkkých tkání v reálném čase

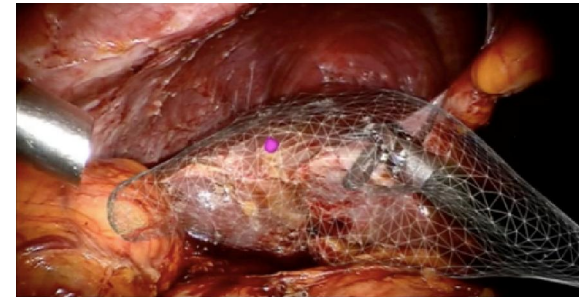
- Využití biomechanických modelů vytvořených z pre-operativních dat pacientů (CT, MRI) pro aplikace v medicíně
 - reálný čas [25Hz] nebo dokonce hmatová (haptická) interakce [$>500\text{Hz}$]



Simulátor operace kataraktu
MSICS



Kryoablace: plánování
umístění elektrody



Laparoskopie: vizualizace
vnitřních struktur

Chirurgické trezážery

Pre-operativní plánování

Navigace během operace

2010

2014

2018

Simulace vyžadují kombinaci různých reprezentací objektů:

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

Aktuálně ustavovaná spolupráce:

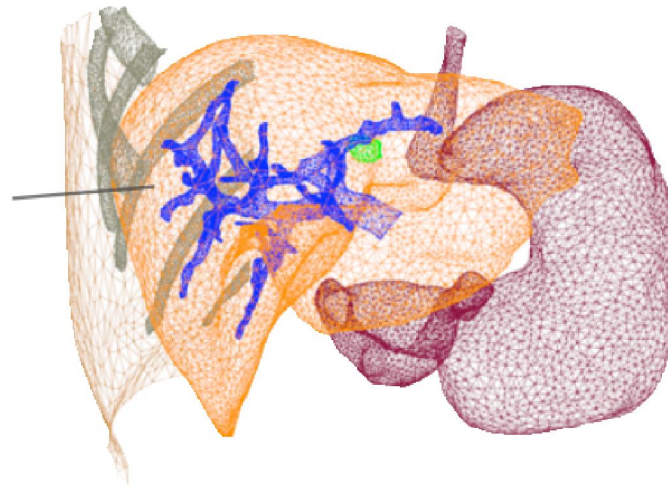
Aspekty simulací měkkých tkání

Nasazení v lékařské praxi

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

Modelování interakcí

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



Numerické metody řešení

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

Mechanické a fyzikální modelování

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

Validace a verifikace modelů

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

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

■ Spolupráce s komerčními partnery I.

- naznačenou spolupráci lze uskutečnit **i s komerčními partnery**
- **základní předpoklady:**
 - ***výsledky spolupráce musí být veřejné***
 - prezentace či publikace ve vědeckých člancích
 - příp. alespoň demo verze výsledků přístupná veřejnosti
 - není na úkor další komercializace
 - nastavení systému pro konkrétní zákazníky může být skryto
 - ***skutečná spolupráce – musí existovat prostor pro naši participaci na výzkumu/spolupráci***
 - nechceme být pouze „hloupý poskytovatel zdrojů“

■ Spolupráce s komerčními partnery II.

• Aktuální/uskutečněné spolupráce:

• Skupina ČEZ + MycroftMind:

- experiment **zpracování informací zasílaných velkým množstvím tzv. *smartmeterů*** (inteligentních elektrických měřičů)
 - zvýšením jejich počtu o dva řády (3,5 mil.)
 - se zahrnutím emulace reálného chování sítě
- cílem je **detekce slabých míst** takovéto infrastruktury pro zpracování, včetně **návrhu metod pro jejich překonání**

• SVS FEM + Centrum AdMaS

- **optimalizace Ansys výpočtů** na clusterech/gridech, grafických procesorech, atp.
- **usnadnění použití** gridové infrastruktury **uživatelům produktů Ansys**
 - *Ansys RSM* – výpočty z desktopu uživatele

■ Spolupráce s komerčními partnery III.

• Aktuální/uskutečněné spolupráce: cont'd.

• (CzechGlobe) + Ness Technologies + MycroftMind

- nově přijatý TAČR projekt
- „Platforma pro poskytování specializovaných meteo-predikcí pro oblast energetiky“
 - **naše role:** optimalizace predikčních modelů, testování výkonnostních omezení, návrh vhodné technické infrastruktury pro produkční provoz
 - **předpokládaná komercializace výsledků** (Ness Technologies)
 - my autorská práva nenárokujeme

• SVS FEM:

- **optimalizace výpočtu** proudění čtyřstupňovou, dvouhřídelovou plynovou turbínou s chlazením lopatek
- vč. následné vizualizace na **SAGE**
 - SW Paraview



Závěr

Národní Gridová Infrastruktura MetaCentrum (CESNET)

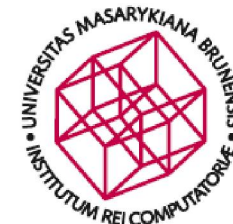
- správa a poskytování **infrastruktury pro akademickou komunitu**
- výpočetní a úložné služby, SW aplikace
- poskytujeme **výjezdní hands-on školení**

Centrum CERIT-SC (ÚVT MU)

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

Spolupráce s komerčními partnery @ CERIT-SC

- skutečná výzkumná/**projektová spolupráce**
- po dobu řešení společného **výzkumně-vývojového projektu lze naše zdroje zpřístupnit i partnerům mimo akademickou sféru**



EUROPEAN UNION

EUROPEAN REGIONAL
DEVELOPMENT FUND
INVESTING IN YOUR FUTURE



OP Research and
Development for Innovation

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

<http://metavo.metacentrum.cz>

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