

Grafická prostředí v Kubernetes

Lukáš Hejtmánek

e-INFRA CZ/CERIT-SC



kubernetes

Prostředí Kubernetes

- Provozováno centrem CERIT-SC v rámci e-INFRA CZ
 - K využití stačí účet v Metacentru
- Vybavení
 - přes 2000 CPU jader
 - 512GB paměti na uzel
 - GPU karty
 - A10, A40, A100 (80GB), A100 MIG, H100
 - Pouze SSD
 - Infiniband

<https://docs.cerit.io>



Grafická prostředí

- Webové aplikace

- Jupyterhub
- Binderhub
- Alphafold

- Nativní aplikace

- Matlab
- Ansys
- Rstudio
- Obecný desktop
- Scipion
- maxquant
- Pycharm
- Code-server



Jupyterhub

- <https://hub.cloud.e-infra.cz> <https://docs.cerit.io/docs/jupyterhub.html>
- Primárně pro Jupyter notebooky
 - Několik připravených obrazů
 - Minimal notebook, Datascience notebook, Tensorflow
 - Obrazy jsou stabilní
 - Možnost připravit vlastní
- Lze pustit navíc Rstudio a Matlab
- Čas běhu není omezený, neaktivní notebooky jsou do týdne ukončeny



Jupyterhub — úložiště

- Možnost připojení úložiště Metacentra
 - skrze sshfs — není extrémně efektivní
- Notebooky mohou mít persistentní domovský adresář
- Instalace dalšího SW
 - U novějších obrazů možná
 - `apt-get update; fakeroot apt-get install [package]`
 - Není persistentní



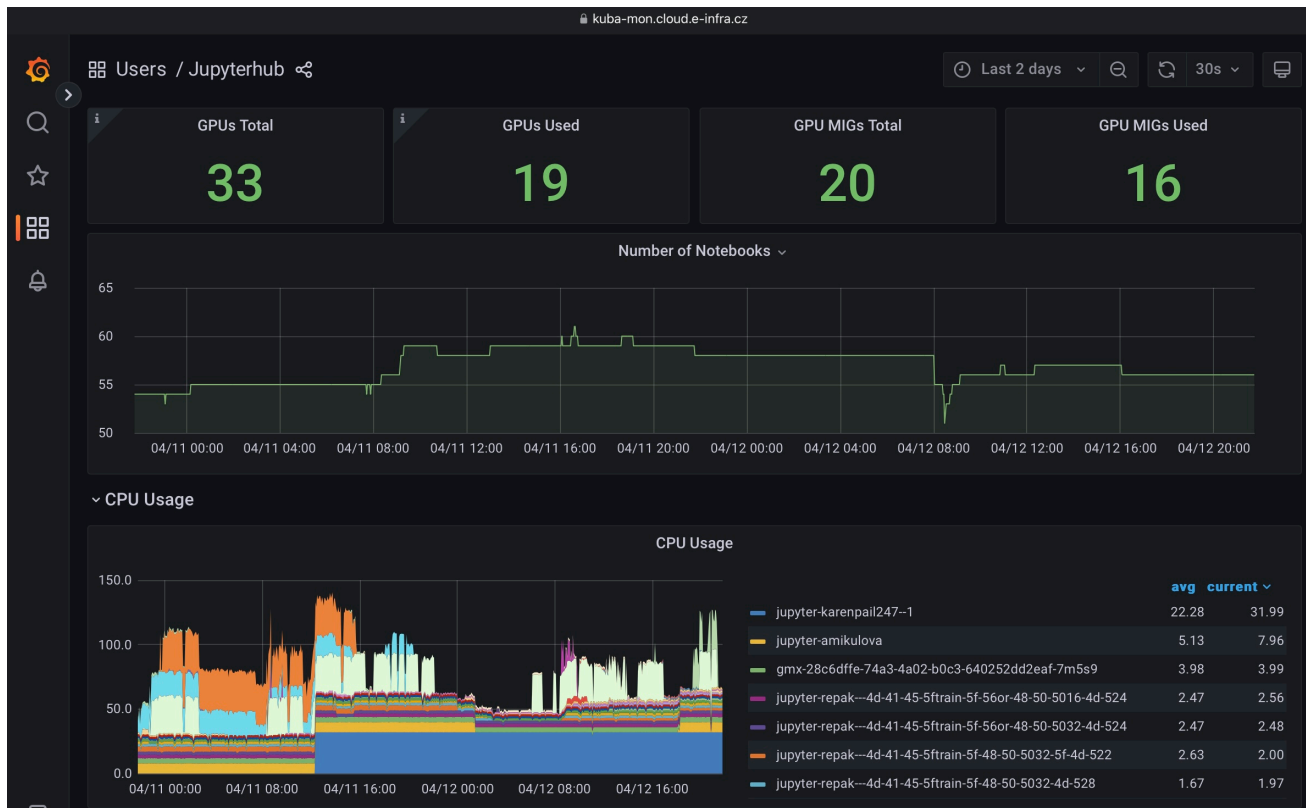
Jupyterhub

- Z běžícího notebooku lze pouštět další úlohy
 - Trochu problematické předávání proměnných
 - Lze pustit i MPI úlohu
- Nelze využívat moduly z AFS
 - Moduly z cvmfs jsou v přípravě
- Plánujeme nasazení obdoby github copilot



Jupyterhub — statistiky

- <https://kuba-mon.cloud.e-infra.cz>



Binderhub

- <https://binderhub.cloud.e-infra.cz> <https://docs.cerit.io/docs/binderhub.html>
- Opět Jupyter notebooky
 - Obraz pro notebook se sestaví z git repozitáře
- Oproti veřejné verzi mybinder je nutné přihlášení
- Binder standardně neumí alokovat zdroje
 - soubor `.resources` v gitu umí specifikovat zdroje včetně GPU
- Vhodnější pro pokročilejší uživatele
 - Log ze sestavení obrazu je k dispozici
 - Log z nespouštějícího se notebooku k dispozici není



Alphafold

- <https://alphafold.cloud.e-infra.cz> <https://docs.cerit.io/docs/alphafold.html>
- Grafické rozhraní k Alphafold predikci proteinů
- Maximálně zjednodušené bez zadávání skriptů
- Dokončení výpočtu oznámeno mailem
- Výsledky lze orientačně zobrazit přímo v prohlížeči
 - Zároveň jsou ukládány na brno12-cerit
- Je integrován mol* webový prohlížeč
 - Při znalosti názvu proteinu lze zobrazit přes mol* vše z EBI databáze



AlphaFold₂

Compute AlphaFold

Compute Colabfold

View Results

Running Jobs

View CIF Protein

Protein name

intricate-burn

Proteins

>Sequence1

Max template date

default

DB Preset

full_dbs

Model Preset

monomer

Precomp MSAS



Predictions per model

5

Run Relax



Make results public



E-mail

xhejtman@ics.muni.cz

Force computation



Version of AlphaFold

Alphafold 2.2.0

✓ Run



AlphaFold₂

Compute AlphaFold

Compute Colabfold

View Results

Running Jobs

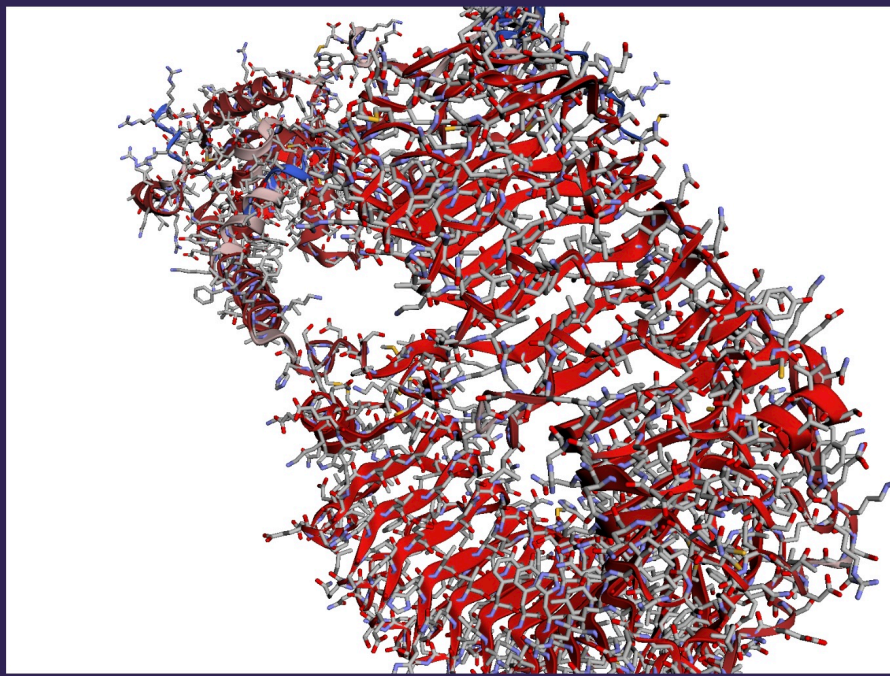
View CIF Protein

Computed Results acchtr4 ▼

- Show all atoms
- Hide atoms

View Result

Click to open Mol* viewer: [OPEN](#)



Model Confidence

- Very low (pLDDT < 50)
- Low (70 > pLDDT > 50)
- Confident (90 > pLDDT > 70)
- Very high (pLDDT > 90)



Alphafold

- Podpora pro základní Alphafold 2.2.0 a 2.3.1
- V beta verzi podpora Colabfold
 - využívá vlastní instanci mmseqs search serveru
 - Podobně rychlá jako veřejný server
- V přípravě podpora
 - Omegafold (Ize využít 80GB karty)
 - esmfold
 - alpha pull down



Nativní grafické aplikace



Rancher

- Nativní aplikace jsou spouštěny přes formulář v Rancheru
 - <https://rancher.cloud.e-infra.cz>
- Aplikace jsou zařazeny v katalogu se základním popisem
 - Vyplněním formuláře lze aplikaci spustit a následně se k ní připojit
 - Aplikace se až na výjimky sama neukončí, je nutné ji smazat



Vzdálená plocha Linuxu

- Základní režimy přístupu
 - VNC
 - Webový prohlížeč
- Aplikace ze vzdálené plochy podporují oba režimy
- Je možné vybrat persistentní home
- Lze připojit úložiště metacentra
 - Je nutné si nastavit přístup <https://storagesecrets.cloud.e-infra.cz>
 - Přihlášení jménem a heslem do Metacentra



VNC přístup

- Připojení VNC klientem nebo safari prohlížečem
- Připojuje se přímo na zadanou adresu
 - nevytváří se předem ssh tunel
- Před startem je nutné zvolit přihlašovací heslo
- Není přístupná 3D akcelerace ani výpočetní GPU
 - V případě zájmu lze výpočetní GPU přidat
- Potíže s útoky na VNC port
- Někdy jsou potíže s DPI a škálováním obrazu



Webový přístup

- Připojení webovým prohlížečem
 - Podporován google chrome, Microsoft Edge, Safari
- Před startem je nutné zvolit jméno a heslo
- Funguje plná 3D akcelerace, jak zobrazování, tak výpočty
- Funguje zvuk
- Velikost obrazu se umí přizpůsobit
 - Horší kvalita daná H264 kompresí



Aplikace vzdálené plochy

- Matlab ve verzích 9.9 a 9.11
- Ansys ve verzích 2019.2, 2020, 2021
- Aplikace podléhají pravidlům využití Metacentra
- Délka běhu kvůli licencím omezena
- Linux Xfce Ubuntu desktop
- Maxquant, Knime pro proteomiku



Scipion

- Desktopová aplikace integrující nástroje pro kryoelektronovou mikroskopii
- Nároky na zdroje
 - Terabyty dat
 - Velké množství paměti
 - GPU
- Aplikace adaptována na běh v Kubernetes s grafickým rozhraním



Projects (scipionuser on scipion-master-scipion-754c7cd846-74xt5)

SCIPION v3.0.12 - Eugeniu - 3.0.31 (core)

File Configuration Help Others

Create Project

TestRelion Modified: a m

TestXmipp Modified: 18 h

TutorialIntro Modified: 18 h

scipion-do Modified: 19 h

TestWorkfl Modified: 19 h

tests Modified: 3 we

ohadii-pe Modified: 3 we

TestRelion

Project Help Others

SCIPION v3.0.12 - Eugeniu - 3.0.31 (core)

View Tomography

- Tomography
 - Particles
 - Preprocess
 - Subtomogram averaging
 - PostProcessing
 - xmipp3 - volume

PROJECT

- 1. import mics finished
- 2. downsample x5 finished
- 3. ...
- 4a. xmipp picking running (done 0/1)
- 4b. Enan boxer saved
- 5. extract particles saved
- 6. ...
- 7. projection matching saved

Xmipp Particle Picker - Manual

File Filters Window Help

Autopick

Activate Training

BPV_1386

1843x1888 pixels; 32-bit; 13MB

Micrographs
1 BPV_1386
2 BPV_1387
3 BPV_1388

Manual: 0 Automated

Reset Micrograph

x=102, y=741, value=-103.50



Aplikace s webovým rozhraním

- Aplikace se po spuštění používají přes Webový prohlížeč
- K dispozici jsou
 - rstudio
 - pycharm
 - code-server



Děkuji za pozornost

