

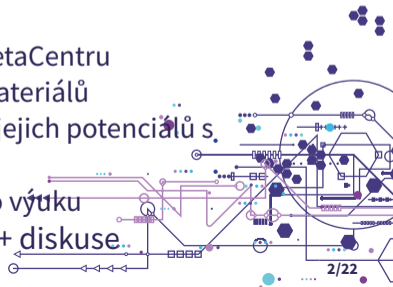
METACENTRUM

Miroslav Ruda

květen 2022

Program semináře

- Novinky z MetaCentra (Miroslav Ruda)
- Novinky v datových úložištích (David Antoš)
- Aktuální stav HPC systému, včetně LUMI (Branislav Jansík)
- Cloudové služby v e-INFRA CZ (Miroslav Ruda)
- 15:00-15:30 přestávka
- Grafické karty a jejich podpora v MetaCentru (Jan Hoidekr)
- Spolupráce s uživateli
 - Umělá inteligence na KKY ZČU v Plzni a (nejen) v MetaCentru
 - Využití VASP, Molpro, Molcas, Gaussian pro vývoj materiálů
 - Výpočty foldovacích trajektorií proteinů a korekce jejich potenciálů s využitím Kubernetes a Jupyter Notebooků
 - Využití virtuálních desktopů s minimální latencí pro výuku
- 17:00 Gridová služba MetaCentrum - Best Practices + **diskuse**



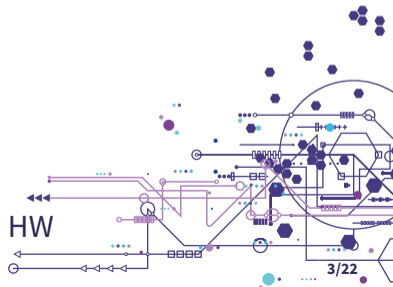
MetaCentrum

Národní distribuované výpočetní prostředí, koordinuje CESNET

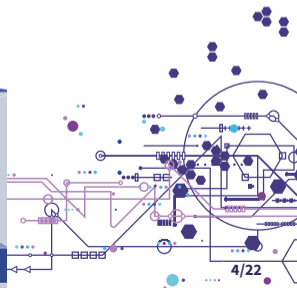
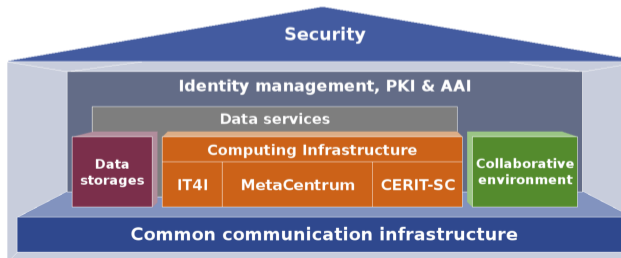
- výpočetní zdroje umístěné na CESNETu, univerzitách, AV ČR
- gridové, cloudové a map-reduce výpočty, velká data
- NGI v evropské e-infrastruktuře EGI, EOSC mandated org.
- komunitní přístup, centrální správa a AAI
- cílená podpora velkých projektů (VI, ESFRI)
- virtualizační platforma pro vysoce dostupné služby

Původní motivace sdílení zdrojů (HW) stále platí

- přenesení nárazové zátěže na volnější zdroje
- a využití jiných zdrojů při výpadku
- poskytnutí vlastních dočasně volných zdrojů
- zdroje pro nastartování projektu, ověření vhodnosti HW
- drahé komerční licence

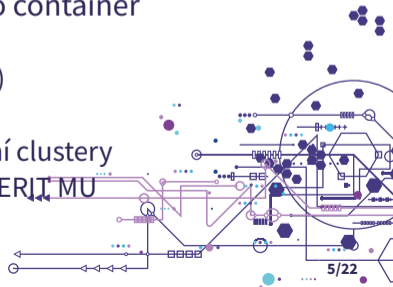


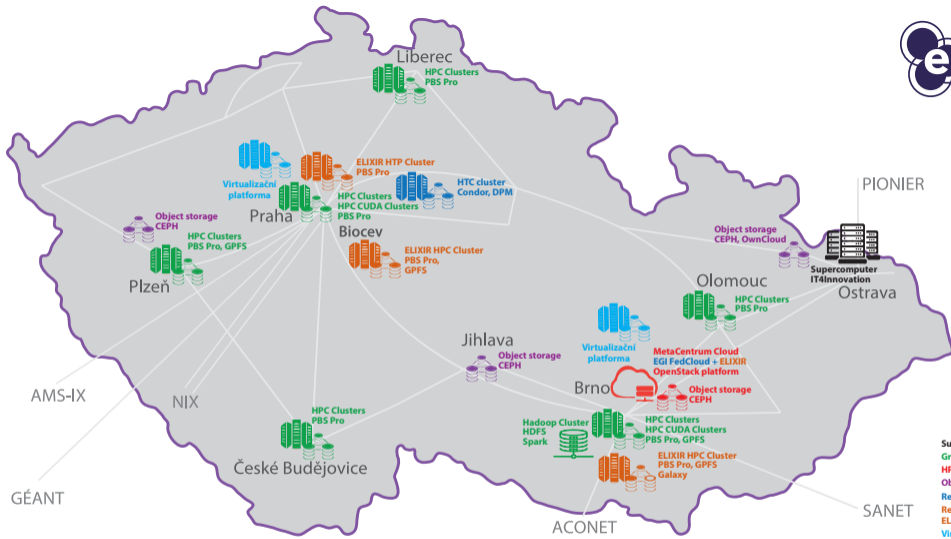
- MetaCentrum (distributed grid) od roku 1998 součást CESNET
 - od začátku spolupráce CESNET, MU, ZČU (,UK, VUTBR)
- od roku 2012 VI CESNET a VI CERIT-SC
 - MetaCentrum integruje CERIT-SC, společný vývoj, včetně cloudu
 - integruje zdroje dalších organizací, včetně VI ELIXIR
- od roku 2020 jediná společná e-infrastruktura e-INFRA CZ
 - CESNET, CERIT-SC (MU), IT4Innovations (VŠB)



Výpočetní modely MetaCentra

- grid, centrálně spravované HTC, HPC clustery
 - dávkové, dlouhé, paralelní výpočty (PBSPro)
 - včetně interaktivních úloh, grafické rozhraní
 - výpočty i v containerech (Singularity)
 - GPU karty, NVIDIA GPU Cloud software
 - distribuované clustery členů e-INFRA CZ a partnerů
- MetaCentrum cloud - místo úloh virtuální stroj nebo container
 - obrazy MetaCentra, EGI, projektové, uživatelské
 - cloudové výpočty a služby pro výpočty (OpenStack)
 - Kubernetes pro správu virtuálních prostředí
 - Terraform nebo Infrastructure Manager pro virtuální clustery
 - centrální instalace v Brně, společná pro CESNET i CERIT MU
- MapReduce - Hadoop/Spark, zpracování dat
 - dedikovaný cluster nahrazen obrazy v cloudu





Supercomputer
 Grid HPC + HTC + Hadoop
 HPC Cloud
 Object DataStorage
 Resources available in EGI
 Resources dedicated to ELIXIR CZ
 Virtualizační platforma

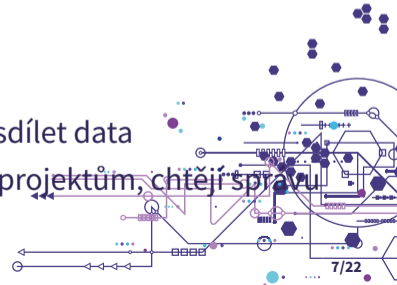
Pravidla přístupu

Primární je akademické užití

- výzkumné, vývojové a výukové účely
- okamžitý přístup, bez podávání projektů
- "placení" formou publikací s poděkováním
- publikace využívány pro určení priority uživatele

Služby MetaCentra (pro)

- jednotlivce - chtějí počítat, zpracovávat data
- projekty - chtějí počítat a potřebují spolupracovat, sdílet data
- instituce - chtějí poskytovat svoje výpočetní zdroje projektům, chtějí správu svých zdrojů



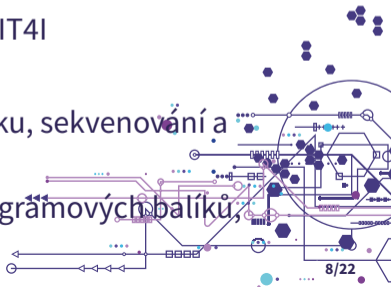
Aplikační software v MetaCentru

Řada aplikačního software - komerční

- matematický software (Matlab, Maple, Mathematica),
- vývojové nástroje (Intel, AMD, NVIDIA, Totalview, Allinea)
- technické simulace (Ansys Fluent, CFX)
- biochemie (Amber, Gaussian, Turbomole)
- v rámci e-INFRA CZ připravujeme větší koordinaci s IT4I

Open-source (life-science, matematika)

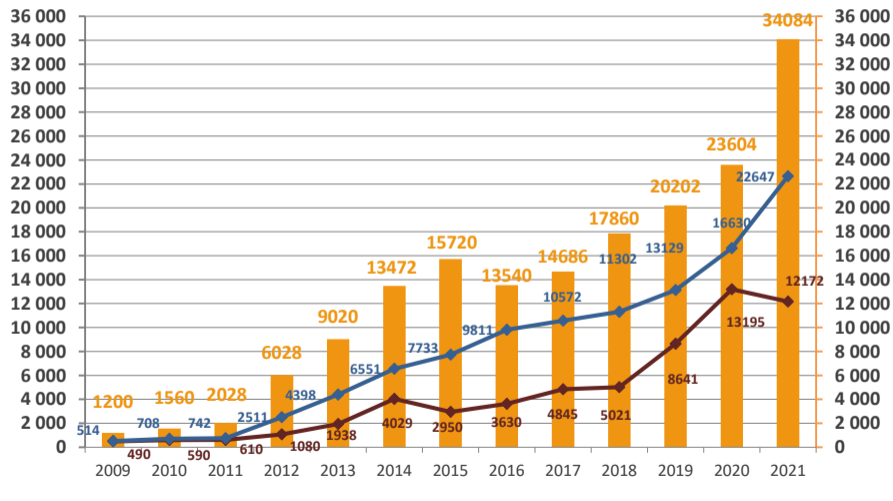
- nárůst balíků pro strukturální biologii, bioinformatiku, sekvenování a analýzu DNA
- za poslední rok více jak 100 nových/změněných programových balíků, celkem více než 2.000 sw. balíků



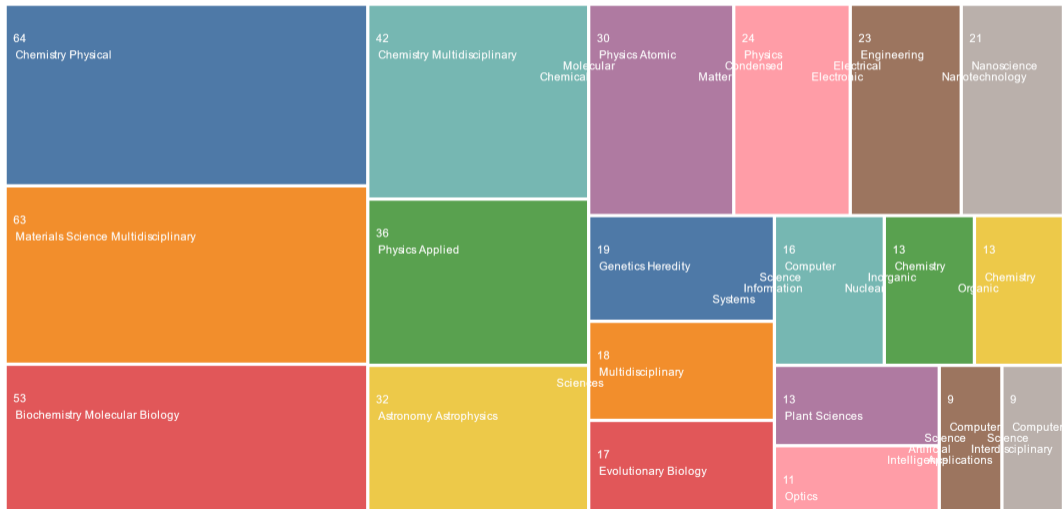
Dlouhodobý vývoj

	2012	2014	2016	2017	2018	2019	2020	2021	4-2022
Počet uživatelů MC	613	1112	1611	1908	2020	2185	2225	2606	1991
Noví uživatelé (Meta)	312	605	742	732	713	762	774	792	270
Počet úloh [milion úloh] Meta/EGI	1,1/ n/a	3,9/ n/a	3,6/ 6	4,7/ 7	5/ 6,7	8,6/ 6,8	13,1/ 10	12,1/ 9,3	
CPU čas [CPU let] Meta/EGI	2500/ n/a	6403/ n/a	9475/ 5963	10572/ 4622	11357/ 4074	13129/ 4531	16630/ 9160	22647/ 9581	
Počet CPU jader vč. EGI	6028	14164	17234	18666	21344	26602	29874	34084	38884

Number of CPUs, executed jobs and corresponding CPU years (Meta VO PBS)

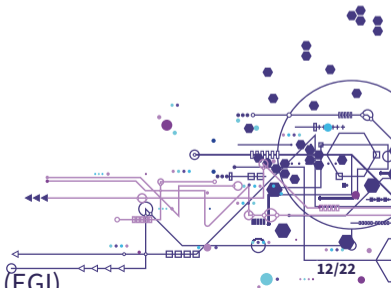


Publikace uživatelů (2021)



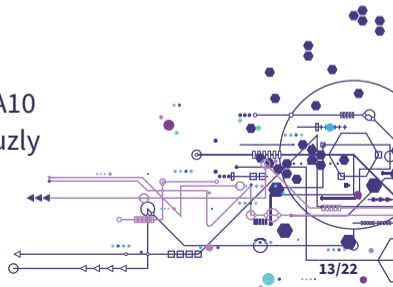
Výpočetní zdroje

- rok 2022: 45.000 CPU jader (x86_64)
 - HD uzly s menším počtem jader (2x4-32)
 - SMP servery - 32-128 jader, do 3 TB RAM
 - specializované servery s 6/10 TB RAM
 - GP-GPU karty - 140+40 uzlů, 370+100 karet
 - NVIDIA T4, 1080 Ti, 2080 Ti, A100, A40
- CESNET (17.000, z toho obnova 3100 v roce 2021)
- CERIT-SC (7.900, z toho nárůst 1250 v roce 2021)
- clustery dalších partnerů
 - VI ELIXIR (5824)
 - FZU (5190 pro LHC/EGI)
 - CEITEC, ZČU, JČU, MU, UK
- cca 15 PB diskových prostor na zpracování dat
 - NFS, GPFS, CVMFS, CephFS
 - objektová storage Ceph (S3, Swift), dCache úložiště (EGI)



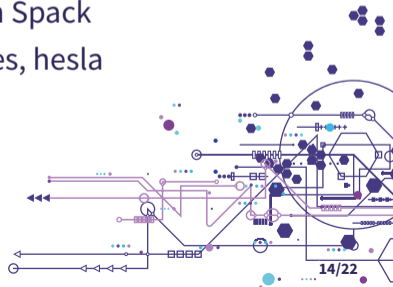
Hardware 2021

- cluster halmir v Brně
 - 31 uzlů, 2x AMD EPYC 7543, 1 TB RAM, 15 TB NVMe
- cluster galdor v Brně
 - 20 uzlů, 2x AMD EPYC 7543, 512 GB RAM, 15 TB NVMe
 - 4x NVIDIA A40
- rozšíření kapacit diskových polí
 - Biocev (500 TB), UOCHB (200 TB), Brno (1200 TB)
- rozšíření Kubernetes - CERIT-SC
 - 18 uzlů, 2x AMD EPYC 7543, 60 TB NVMe, celkem 6xA10
 - experimenty s distribuovaným filesystemem přes uzly
- fer.natur.cuni.cz - Přírodovědecká fakulta UK
 - celkem 24x NVIDIA RTX A4000
 - v součtu již 1500 CPU jader, 56 GPU karet



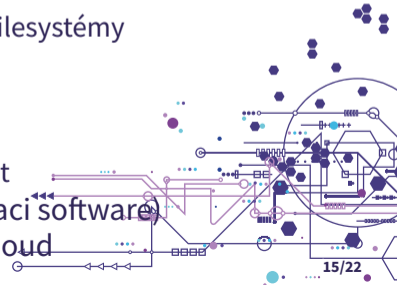
Novinky za rok 2021

- sjednocené AAI přes e-INFRA CZ
 - viz přednáška dnes dopoledne
- zpřístupněny nástroje pro využití S3 úložišť DU
- posílení podpory pro GP-GPU - NGC, Singularity, AlphaFold
- postupný přechod na kompilaci software nástrojem Spack
- bezpečnost - sledování přístupů z neobvyklých adres, hesla
- možnost provozovat výpočetní cluster v MS Azure
- zprovoznění služeb Kubernetes a Sensitive Cloud
- druhá verze lehkého portálu pro OpenStack



Plány na další období

- rok 2022 je poslední rok projektu OP VVV2
 - další rozšíření výpočetní kapacity
 - HD clustery UMG, Brno (CESNET)
 - SMP s GP-GPU v Brně (CERIT-SC)
 - VI hodnocena jako excelentní, připravujeme pokračování od 2023
- rozšíření spolupráce v rámci e-INFRA CZ
 - příprava společné dokumentace
 - průchodnost mezi MetaCentrem a IT4I - software, filesystémy
 - další využití služeb od DU - objektová storage S3
 - další instalace OpenStack v IT4I
- příprava na integraci s úložišti z EOSC NDI
 - možnost data vytvořit a zpracovat u nás, přenos dat
- přechod na nový styl modules (a Spack pro kompilaci software)
- rozvoj cloudových služeb - Kubernetes, Sensitive Cloud
 - viz další přednáška





Děkuji za pozornost

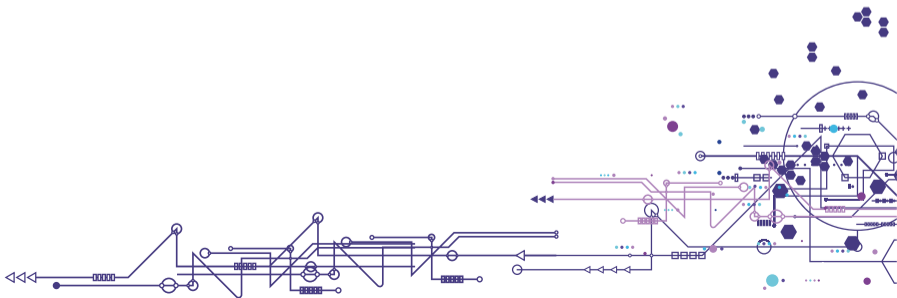
<https://www.metacentrum.cz>

A logo consisting of two concentric circles with a gap between them, forming a partial ring. The text 'e-infra.cz' is centered within the inner circle.

e-infra.cz

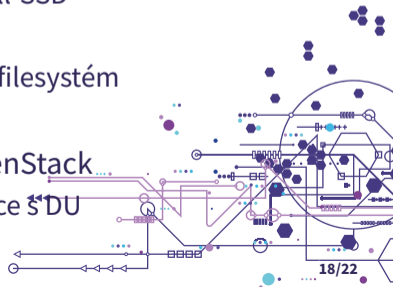


Záložní slidy



Úložné kapacity MetaCentra

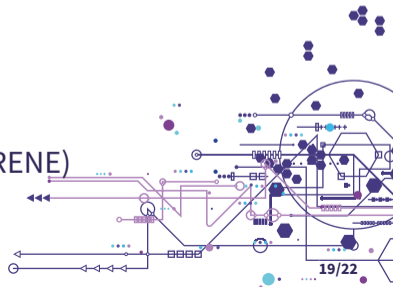
- data semi-permanentní = určená pro zpracování v MetaCentru
 - zálohy a archivy nutno přesunout do služeb DU
- sdílený /home pro všechny clustery v jednom městě
 - NFS, větší instalace s pomocí GPFS
 - na dalších clusterech viditelné ve /storage/
 - zpravidla disková pole, SSD cache, experimenty s all-SSD
- dočasný scratch prostor v každém uzlu clusteru
 - zpravidla lokální SSD disk, experimentálně sdílený filesystem
- ve struktuře /storage/ dostupné i archivy DU
- objektová storage Ceph pro cloudové prostředí OpenStack
 - přes protokol S3 bude dostupné i v gridu, spolupráce s DU
- speciální případy – HDFS pro Hadoop/Spark



Spolupráce s partnery

Spolupráce s projekty = motivace vývoje nových služeb

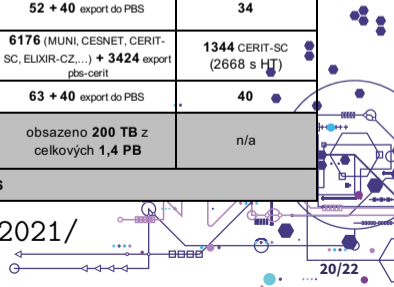
- LHC, Auger, CTA, Belle
 - původní motivace gridu, nadále aktivní v EGI
- ELIXIR (OpenScreen, CCT, Czech Bioimaging)
 - spolupracující VI, zdroje začleněné do MetaCentra
 - spolupráce při provozu služeb ELIXIRu
 - life-science je největší konzument zdrojů
- ELI, BBMRI, CLARIN, ICOS
 - zejména na úrovni EGI
- výzkumná centra CzechGlobe, CEITEC, (Recetox, EIRENE)
 - dlouhodobí uživatelé, vazba přes CERIT-SC
- ESA – CollGS, Data Relay Hub



Využití v roce 2021

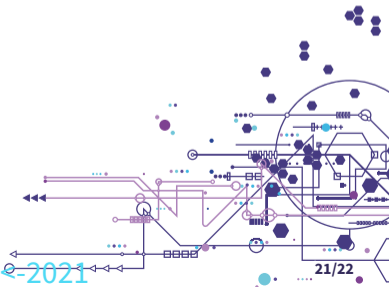
MetaCentrum 2021	Celkem MetaVO	meta-pbs	cerit-pbs	elixir-pbs	MetaCentrum Cloud	Kubernetes
Počet úloh / spuštěných VM strojů (2021)	12 172 476	6 575 865	4 638 124	943 360	15 127	v provozu od října 2021 n/a
Propočítaný CPU čas (walltime) [CPU let] (2021)	22 647	11558	4615	1621	4481 (včetně 641 FedCloud)	373
Počet uživatelů ke konci prosince 2021	2606 uživatelů MetaVO			86 uživatelů ELIXIR-CZ VO	176 projektů / 535 individuálních účtů	10 projektových účtů
Alokovaná kapacita CPU jader prosinec 2021	34 084	17164 z toho CESNET 10972	6656 (6384 CERIT, 112 UEB, 160 elixir)	2936 (plus 160 eli v pbs-cerit)	6048 (MUNI, CESNET, CERIT-SC, ELIXIR-CZ,...) + 3424 export pbs-cerit	1280 (2560 HT jader)
Počet evidovaných GPU karet ke konci prosince 2021	434	288	20 + 40 z cloudu	0	52 + 40 export do PBS	34
Alokovaná kapacita CPU jader duben 2022	38 884	20428 z toho CESNET 14236	6656 (6384 CERIT, 112 UEB, 160 elixir)	2936 (plus 160 eli v pbs-cerit)	6176 (MUNI, CESNET, CERIT-SC, ELIXIR-CZ,...) + 3424 export pbs-cerit	1344 CERIT-SC (2668 s HT)
Počet evidovaných GPU karet v dubnu 2022	531	368	20 + 40 z cloudu	0	63 + 40 export do PBS	40
Storage konec 2021	obsazeno 7,6 PB z celkových 15 PB			obsazeno 600 TB z 2 PB , z toho 1,7 PB pro citlivá data	obsazeno 200 TB z celkových 1,4 PB	n/a
Publikace s poděkováním MC/NGI z 2021	381 Perun / 414 WoS					

<https://metavo.metacentrum.cz/cs/state/stats/2021/>



GPU karty v MetaCentru

- CESNET cluster adan, 122x NVIDIA T4, hlavní zdroj pro HTC
- CESNET cluster galdor, 88x NVIDIA A40 <- HPC cluster
- CERIT glados, 35xNVIDIA 1080Ti (15 v cloudu)
- CERIT cluster gita, 28x 2080 Ti (16 v cloudu)
- CERIT cluster zia, 20x NVIDIA A100 <- nejvýkonnější karty
- clustery partnerů z NCBR MU, KKY ZCU, NATUR UK
 - server cha.natur.cuni.cz, 8x GeForce 2080 Ti
 - cluster fau.natur.cuni.cz, 8x Quadro RTX 5000
 - cluster fer.natur.cuni.cz, 32x RTX A4000 <-2022
 - cluster konos, 32x GeForce 1080Ti
 - cluster zubat, 16x Tesla K20
- OpenStack cloud
 - 20xNVIDIA T4 CESNET, 12xNVIDIA T4 ELIXIR
- Kubernetes CERIT-SC, 24xNVIDIA A40, 6xNVIDIA A10 <-2021



Projekty

