



# VĚDECKÉ VÝPOČTY V METACENTRU

Miroslav Ruda

CESNET

---

11.12. 2017

Praha



Národní distribuované výpočetní prostředí

- výpočetní zdroje umístěné na univerzitách a AV ČR
- gridové, cloudové a map-reduce výpočty
- NGI v evropské e-infrastruktuře EGI, EOSC

Původní motivace sdílení zdrojů (HW, SW) stále platí

- přenesení nárazové zátěže na volnější zdroje
- a využití jiných zdrojů při výpadku
- poskytnutí vlastních dočasně volných zdrojů
- drahé komerční licence

Záběr postupně rozšířen o cloudové služby, zpracování rozsáhlých dat, cílenou podporu velkých projektů



## Služby MetaCentra (pro)

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

## Podpora uživatelských komunit/spolupráce

- LHC, Auger, CTA, Belle
- ELI, ELIXIR, BBMRI, CLARIN, ICOS
- CzechGlobe, CEITEC, ESA

## Projektové zajištění

- rozvoj infrastrukturních služeb - projekty H2020
  - INDIGO DataCloud, AARC2, GN4, EXCELERATE
- integrace s evropskou e-infrastrukturou EGI
  - EGI ENGAGE, EOSC-hub

- aktuálně 15.000 CPU jader (x86\_64)
  - HTC uzly s menším počtem jader (2x4-12)
  - SMP servery - 32-80 jader, do 1 TB RAM
  - dva servery SGI UV2000 - 288/384 jader, 6 TB RAM
  - výpočetní uzly s GP-GPU kartami
- největší poskytovatelé – CESNET, CERIT-SC, FZU
  - clustery CEITEC, ZČU, JČU, AV ČR, ČVUT, TUL
- cca 5 PB diskových prostor na zpracování dat
  - NFS, GPFS
  - HDFS pro Hadoop/Spark
  - objektová storage Ceph
  - DPM úložiště

- **grid - centrální správa, primárně pro výpočty**
  - dávkové, dlouhé, paralelní, master-slave, HTC
  - jsou možné i interaktivní úlohy, grafické rozhraní
- **cloudové výpočty - místo úloh celý virtuální stroj**
  - obrazy MetaCentra, projektové, uživatelské
  - ne obecný web-hosting
- **MapReduce - Hadoop/Spark, zpracování dat**
- **řada aplikačního software - komerční**
  - mat. software (Matlab, Maple, Mathematica),
  - vývojové prostředí (Intel, PGI, Totalview, Allinea)
  - technické simulace (Ansys Fluent, CFX)
  - biochemie (Amber, Gaussian, Turbomole, Molpro)
- **open-source (life-science, matematika, statistika)**
  - nárůst balíků pro strukturální biologii, bioinformatiku, sekvenování a analýzu DNA

- primární je akademické užití - výzkumné, vývojové a výukové účely
  - podpora volného přístupu, bez podávání projektů
  - "placení" formou publikací s poděkováním
  - publikace využívány pro určení priority uživatele
- komerční využití je možné, ale při dodržení CESNET AUP, licenčních podmínek hardware a software
  - zpravidla na zdrojích vlastněných jiným subjektem
  - MetaCentrum zdroje za úplatu neposkytuje
- další zdroje poskytují vědecké skupiny
  - centrální správa zajištěná MetaCentrem
  - vlastníci mají dedikovaný nebo privilegovaný přístup na svoje zdroje, konkrétní forma podle dohody

- oblast life-science je dlouhodobě největší uživatel
- dedikace části zdrojů pro experimenty se změnou našeho prostředí, vývoj specifických řešení
- podpora specifických rozhraní (Mascot, Galaxy, Chipster)
- urychlení zapojení partnerů do mezinárodních projektů
- postupně se nové vlastnosti a balíky dostávají do celého MetaCentra
- CESNET je členem českého konsorcia ELIXIR, IT partnerem v připraveném projektu VI ELIXIR
  - zdroje dedikované pro projekt
  - IT podpora pro vybrané skupiny



The logo for cesnet, featuring the word "cesnet" in a white, lowercase, sans-serif font. Below the text is a graphic element consisting of a series of white dots of varying sizes, arranged in a pattern that suggests a network or data flow.

cesnet  
.....

Děkuji za pozornost

<http://www.metacentrum.cz>

