

Praktické rady a tipy pro nové uživatele a zhodnocení uživatelského dotazníku

Jiří Vorel

Praha, Klub Lávka

vorel@cesnet.cz meta@cesnet.cz

#PROPOJUJEME VĚDU

2. 10. 2025



Obecný úvod, představení služeb

■ MetaCentrum je

- Národní distribuované (gridové) výpočetní prostředí
- Koordinováno sdružením CESNET, součást e-INFRA CZ
- Dostupné celé akademické obci v ČR
- Bez grantových soutěží, přístup kdykoliv, ihned po schválení přihlášky
- **Zcela zdarma (děkujte v publikacích projektu e-INFRA CZ ID:90254)**



■ MetaCentrum nabízí

- Přístup ke sdíleným HW zdrojům (CESNET, CERIT-SC, AV ČR, univ., VI Elixir)
- Licence komerčního SW (Ansys, Gaussian, Matlab, MolPro,...)
- Účty pro partnery (zahraniční/komerční sféra, řeší se individuálně)
- **Školení (také) pro menší skupinky uživatelů přímo na Vašem pracovišti**

<https://www.cesnet.cz/>

<https://www.metacentrum.cz/>

<https://www.e-infra.cz/>

<https://docs.metacentrum.cz/>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/terms#acknowledgements-and-publications>



■ MetaCentrum mohou použít

- Jednotlivci (využití výpočetních zdrojů)
- Skupiny/projekty (sdílení zpracovávaných dat)
- Instituce (začlenění zdrojů pod centrální správu)
 - Privilegovaný přístup, náhrada během výpadku, extra kapacita při vysoké zátěži

■ MetaCentrum neumí

- Dedikovat zdroje za úplatu
- Dlouhodobě a bezpečně ukládat cenná data (tj. archivace dat)
- Poskytovat extrémní množství zdrojů jednotlivým úlohám
- Zpracovávat citlivá data (Kubernetes Sensitive Cloud v rámci e-INFRA CZ, koordinuje CERIT-SC) <https://www.cerit-sc.cz/>
- OS Windows

<https://du.cesnet.cz>

datacare cesnet

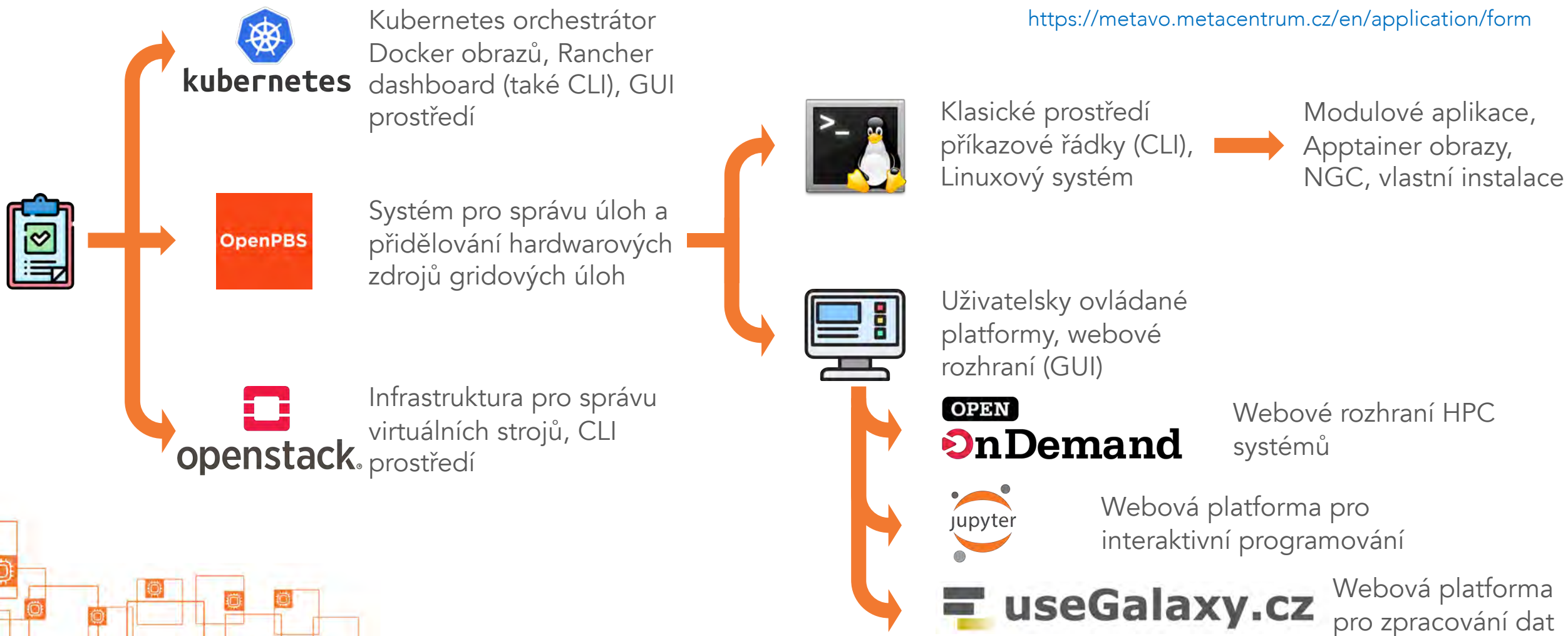


The image features a close-up of the Ring of Power, a golden ring with intricate Elvish script (Tengwar) engraved around its band. The ring is positioned diagonally across the frame. The background is a textured, golden-brown surface that resembles a map or parchment, with various lines and patterns. The lighting is warm and dramatic, highlighting the metallic sheen of the ring and the texture of the background. The text "JEDNA PŘIHLÁŠKA VLÁDNE VŠEM" is overlaid in the center in a white, serif font.

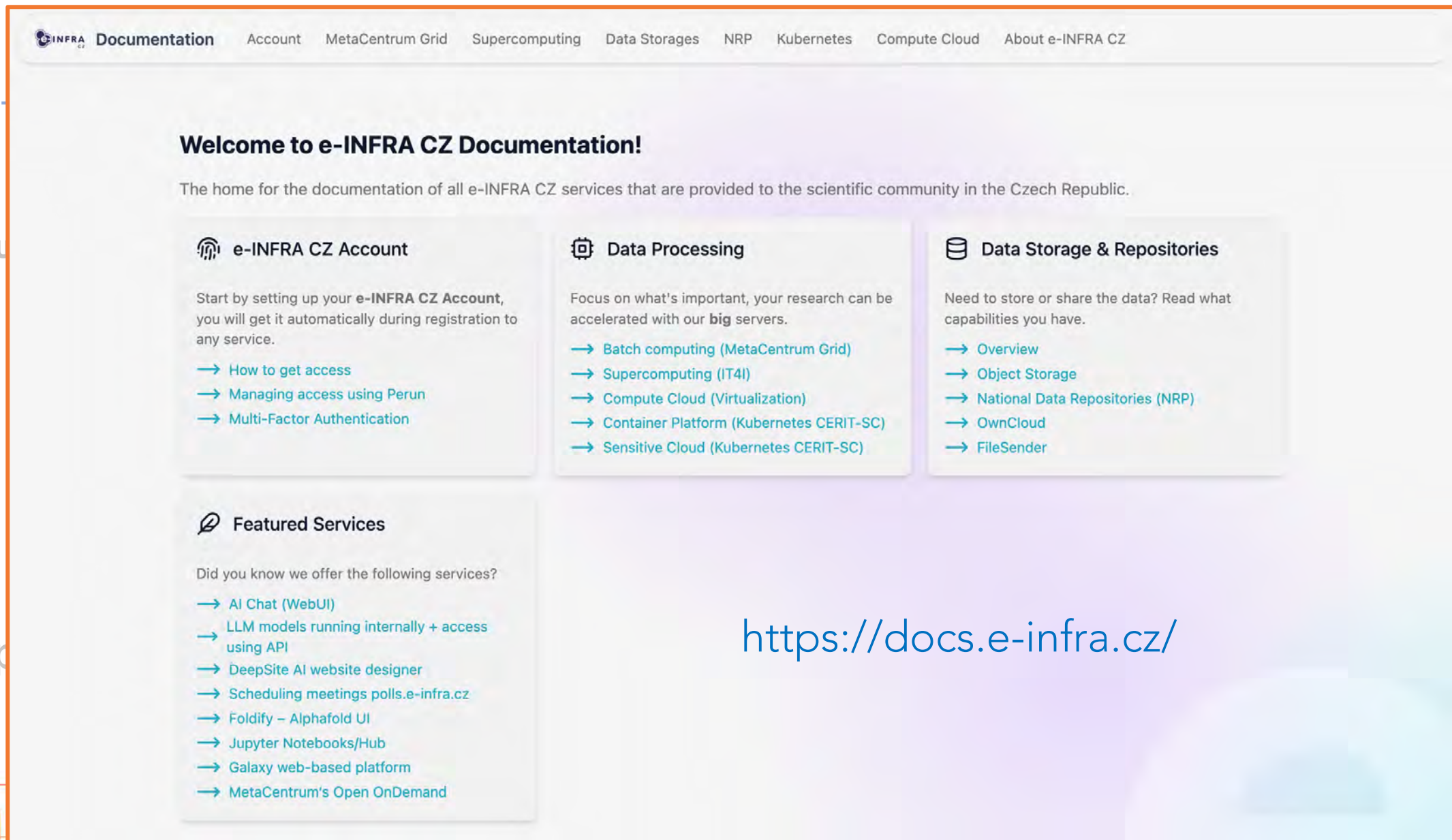
JEDNA PŘIHLÁŠKA VLÁDNE VŠEM

- Registrovaný uživatel získává přístup k několika různým službám

<https://metavo.metacentrum.cz/en/application/form>



■ Registrace



Documentation Account MetaCentrum Grid Supercomputing Data Storages NRP Kubernetes Compute Cloud About e-INFRA CZ

Welcome to e-INFRA CZ Documentation!

The home for the documentation of all e-INFRA CZ services that are provided to the scientific community in the Czech Republic.



e-INFRA CZ Account

Start by setting up your **e-INFRA CZ Account**, you will get it automatically during registration to any service.

- How to get access
- Managing access using Perun
- Multi-Factor Authentication



Data Processing

Focus on what's important, your research can be accelerated with our **big** servers.

- Batch computing (MetaCentrum Grid)
- Supercomputing (IT4I)
- Compute Cloud (Virtualization)
- Container Platform (Kubernetes CERIT-SC)
- Sensitive Cloud (Kubernetes CERIT-SC)



Data Storage & Repositories

Need to store or share the data? Read what capabilities you have.

- Overview
- Object Storage
- National Data Repositories (NRP)
- OwnCloud
- FileSender



Featured Services

Did you know we offer the following services?

- AI Chat (WebUI)
- LLM models running internally + access using API
- DeepSite AI website designer
- Scheduling meetings polls.e-infra.cz
- Foldify - Alphafold UI
- Jupyter Notebooks/Hub
- Galaxy web-based platform
- MetaCentrum's Open OnDemand

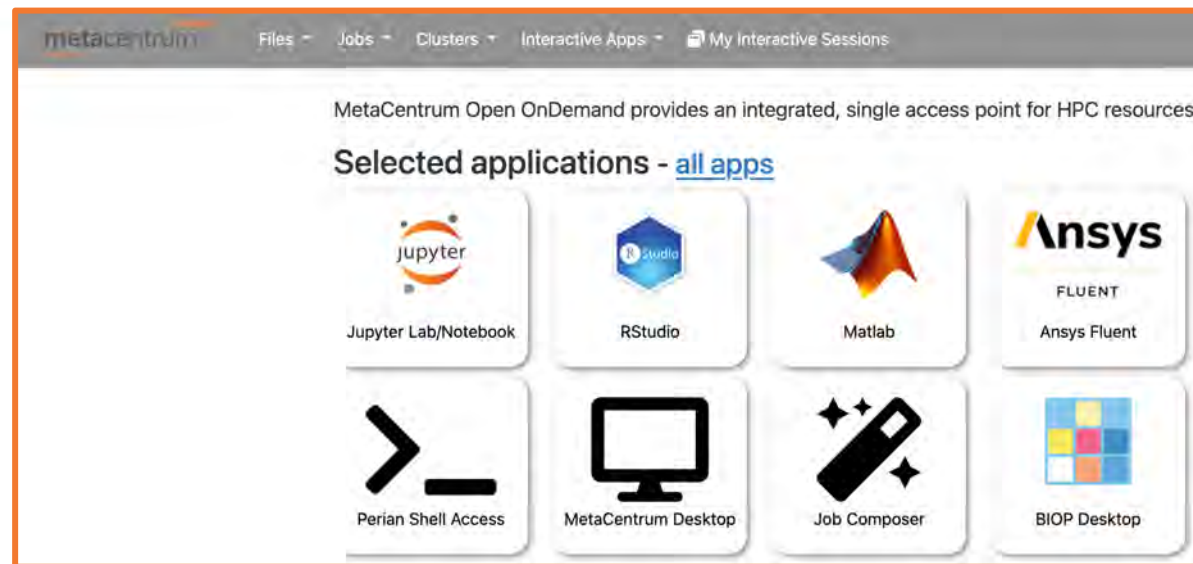
<https://docs.e-infra.cz/>

■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací

Open OnDemand GUI

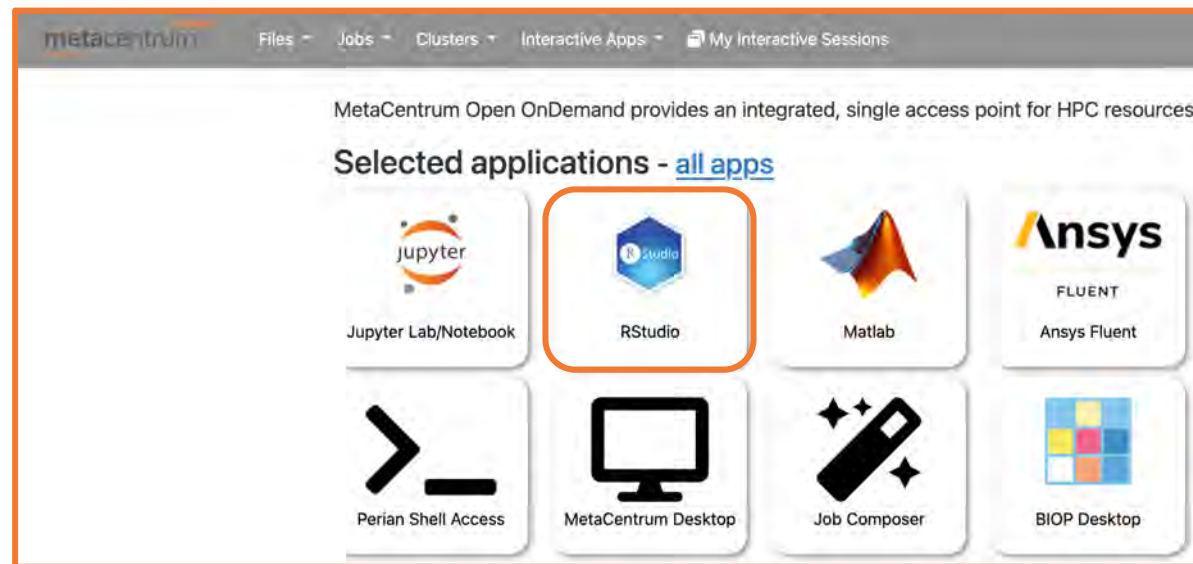


■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací

Open OnDemand GUI

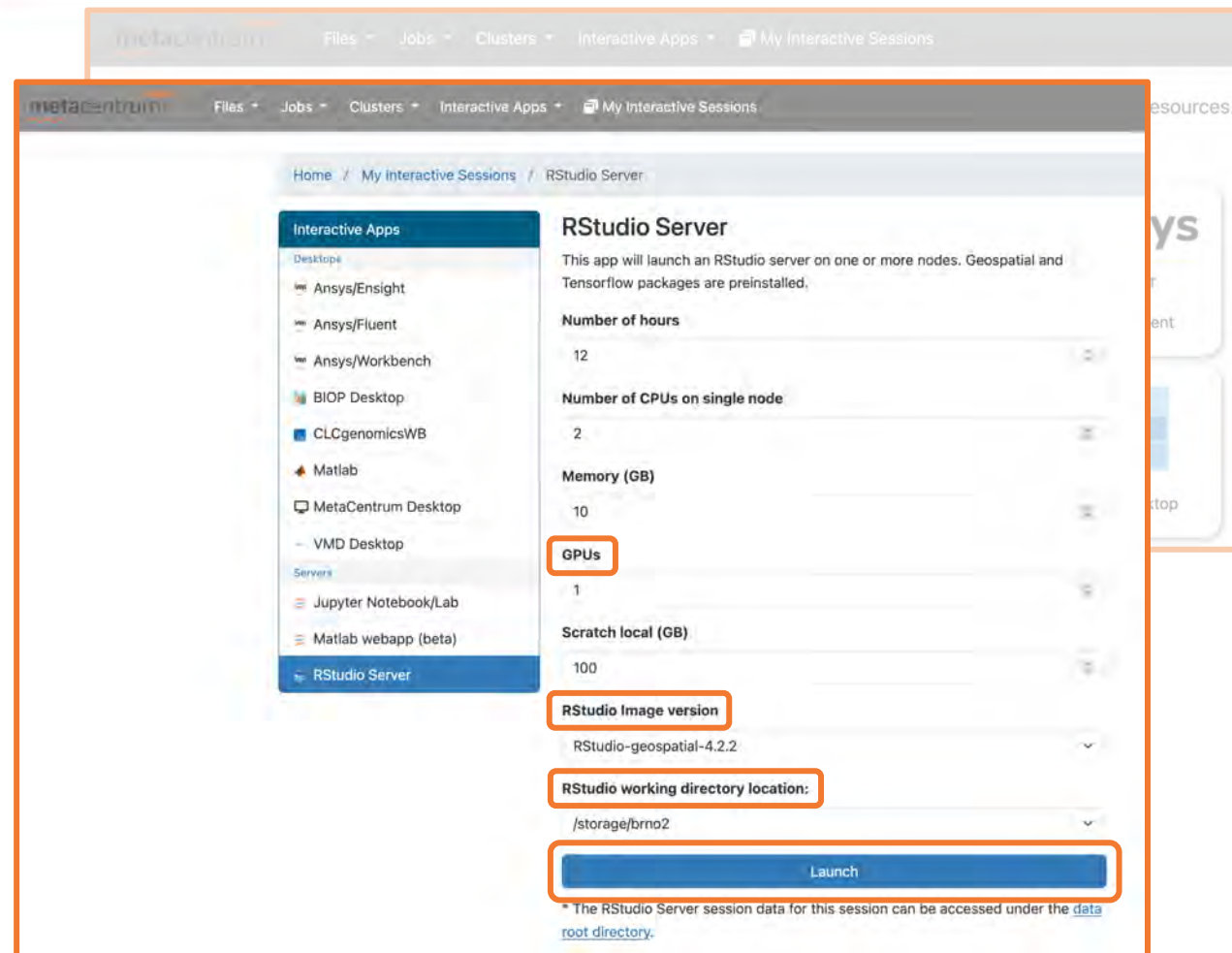


■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací

Open OnDemand GUI



■ Open OnDemand



<https://ondemand.metacentrum.cz>

- Webová aplikace
- Spouštění (nejednotlivě)

The screenshot displays the Open OnDemand web interface. At the top, a navigation bar includes links for Files, Jobs, Clusters, Interactive Apps, and My Interactive Sessions. A green notification banner at the top center states "Session was successfully created." Below this, the breadcrumb trail shows "Home / My Interactive Sessions".

The main content area is divided into two panels. The left panel, titled "Interactive Apps", lists several desktop environments: Ansys/Ensignt, Ansys/Fluent, Ansys/Workbench, BIOP Desktop, and CLCgenomicsWB. The right panel displays details for a selected "RStudio Server (13263397.pbs-m1.metacentrum.cz)" session. This panel shows the session status as "Starting" with "1 node" and "2 cores". It also provides the creation timestamp "Created at: 2025-09-28 10:36:54 CEST" and the "Session ID: 785f8f82-c49d-4d8e-bd90-fbf0de96f97a". A red "Delete" button is visible. A message at the bottom of the panel states: "Your session is currently starting... Please be patient as this process can take a few minutes."

Below the main content area, a configuration section for the "RStudio Server" is shown. It includes a "Rstudio Image version" dropdown set to "Rstudio-geospatial-4.2.2", a "Rstudio working directory location" dropdown set to "/storage/brno2", and a prominent blue "Launch" button. A footnote at the bottom indicates: "* The RStudio Server session data for this session can be accessed under the [data root directory](#)."

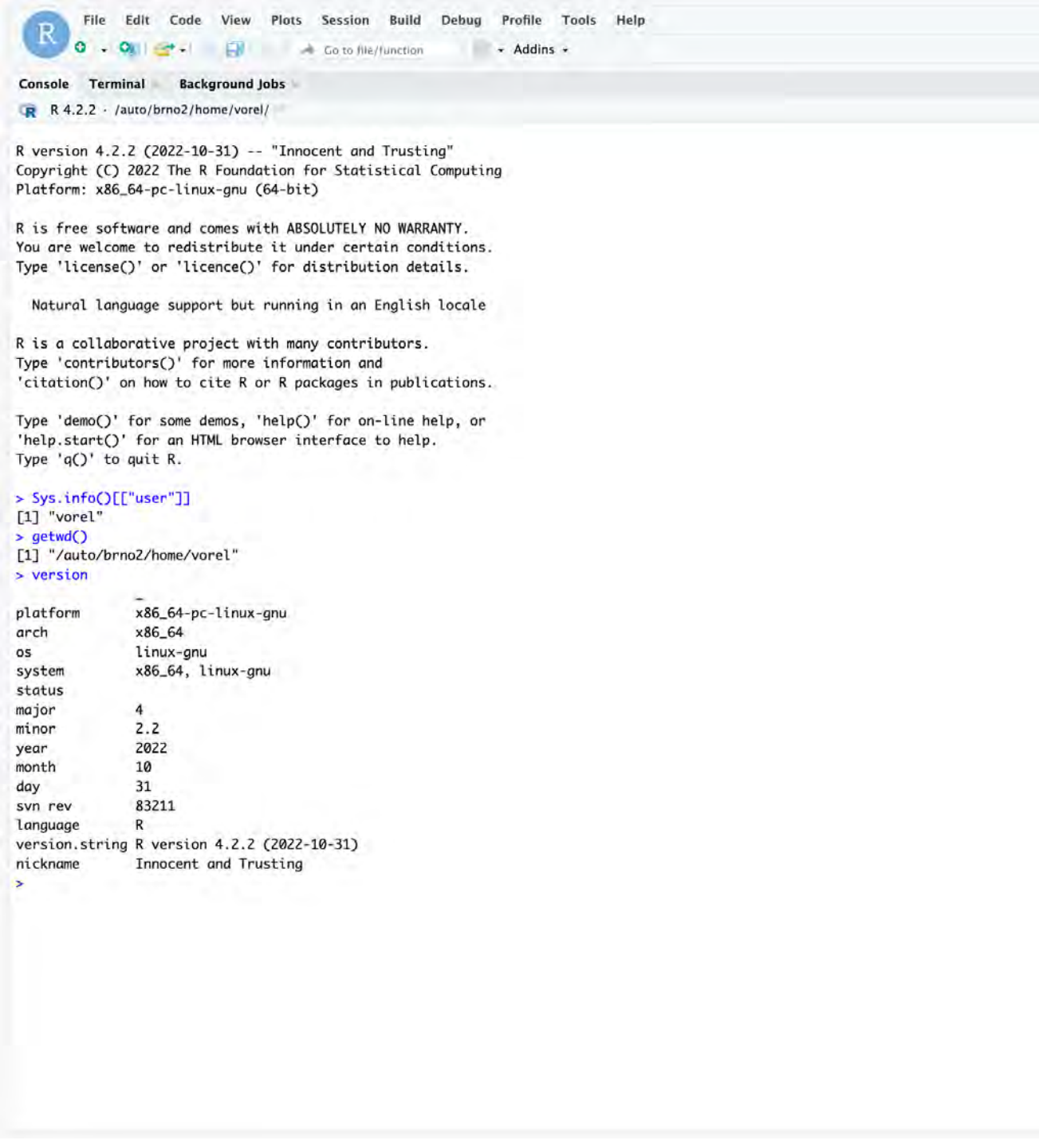
■ Open OnDemand



<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace
- Spouštění (vytváření)

The screenshot displays the Open OnDemand web interface. At the top, a navigation bar includes links for Files, Jobs, Clusters, Interactive Apps, and My Interactive Sessions. A green notification banner at the top left states "Session was successfully created." Below this, the breadcrumb "Home / My Interactive Sessions" is visible. On the left sidebar, under "Interactive Apps", a list of available applications is shown, including Ansys/Ensignht, Ansys/Fluent, Ansys/Workbench, BIOP Desktop, CLCgenomicsWB, Matlab, and MetaCentrum Desktop. The main content area displays details for a selected "RStudio Server" session (ID: 13263397.pbs-m1.metacentrum.cz), which is currently "Running" on 1 node with 2 cores. Key details include the host (galdor19.metacentrum.cz), creation time (2025-09-28 10:36:54 CEST), time remaining (11 hours and 54 minutes), and session ID (785f8f82-c49d-4d8e-bd90-fbf0de96f97a). A blue button labeled "Connect to RStudio Server" is highlighted with an orange box. To the right, a "Delete" button is also visible. At the bottom right, a "Launch" button is shown, with a note indicating that session data can be accessed under the /storage/brno2 root directory.



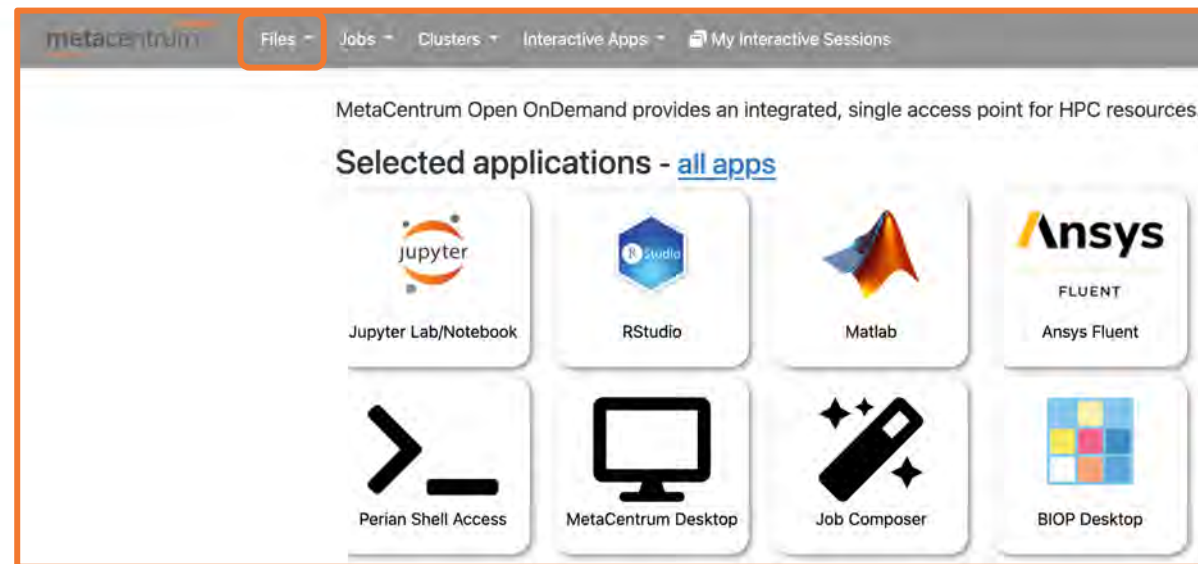
The screenshot displays the RStudio application window. At the top, the 'Environment' pane is active, showing a message: 'Environment is empty'. Below this, the 'Home' pane is visible, featuring a grid of links categorized under 'R Resources', 'Manuals', 'Reference', and 'Miscellaneous Material'. The 'R Resources' section includes links like 'Learning R Online' and 'CRAN Task Views'. The 'Manuals' section includes 'An Introduction to R'. The 'Reference' section includes 'Packages'. The 'Miscellaneous Material' section includes 'About R', 'License', and 'NEWS'. On the right side of the 'Home' pane, there is a section for 'RStudio' with links like 'Posit Support' and 'RStudio Community Forum'. The top of the RStudio window shows the 'Project: (None)' status and the 'Environment' pane tabs.

■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací
- Procházení úložišť (záložka „Files“)

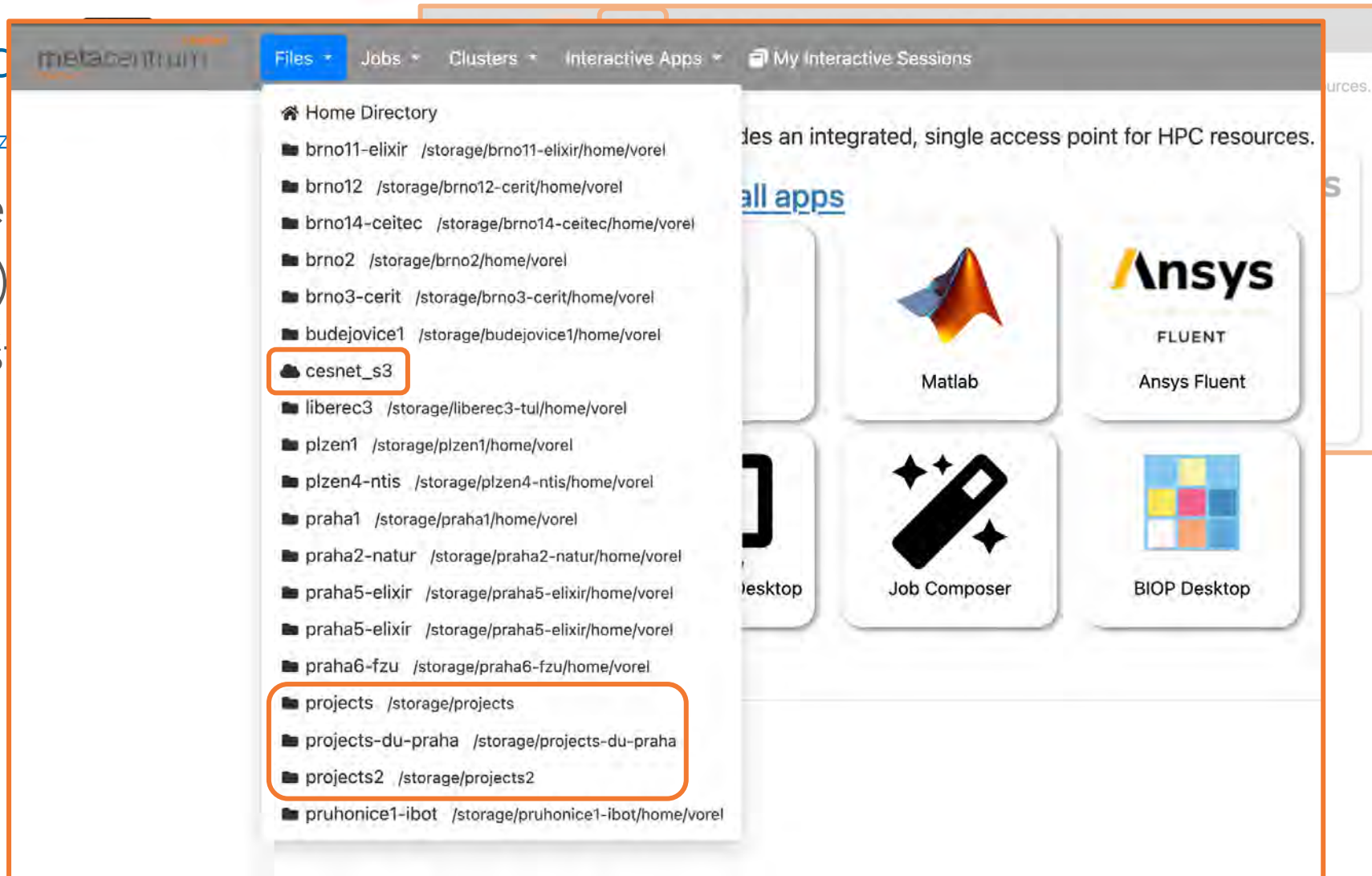
Open OnDemand GUI



■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz>

- Webová aplikace
- Spouštění (nejen)
- Procházení úložišť



Open in TerminalRefreshNew FileNew DirectoryUploadDownloadCopy/MoveDelete

- Home Directory
- brno2brno12praha5-elixirbrno11-elixirbrno14-ceitecbrno3-ceritbudejovice1liberec3plzen1plzen4-ntispraha1praha2-naturpraha5-elixirpraha6-fzupruhonice1-ibotprojectsprojects2projects-du-prahacesnet_s3

cesnet_s3: /Change directoryCopy path

Show Owner/ModeShow DotfilesFilter:

Showing 1 rows - 0 rows selected

	Type	Name	Size	Modified at
☐		meta-archive	-	20. 8. 2024 17:59:00

Open in Terminal

Refresh

New File

New Directory

Upload

Download

Copy/Move

Delete

- Home Directory
- brno2

brno12

praha5-elixir

brno11-elixir

brno14-ceitec

brno3-cerit

budejovice1

liberec3

plzen1

plzen4-ntis

praha1

praha2-natur

praha5-elixir

praha6-fzu

pruhonice1-ibot

projects

projects2

projects-du-praha

cesnet_s3

cesnet_s3: / meta-archive /

Change directory

Copy path

☐ Show Owner/Mode

☐ Show Dotfiles

Filter:

Showing 12 rows - 0 rows selected

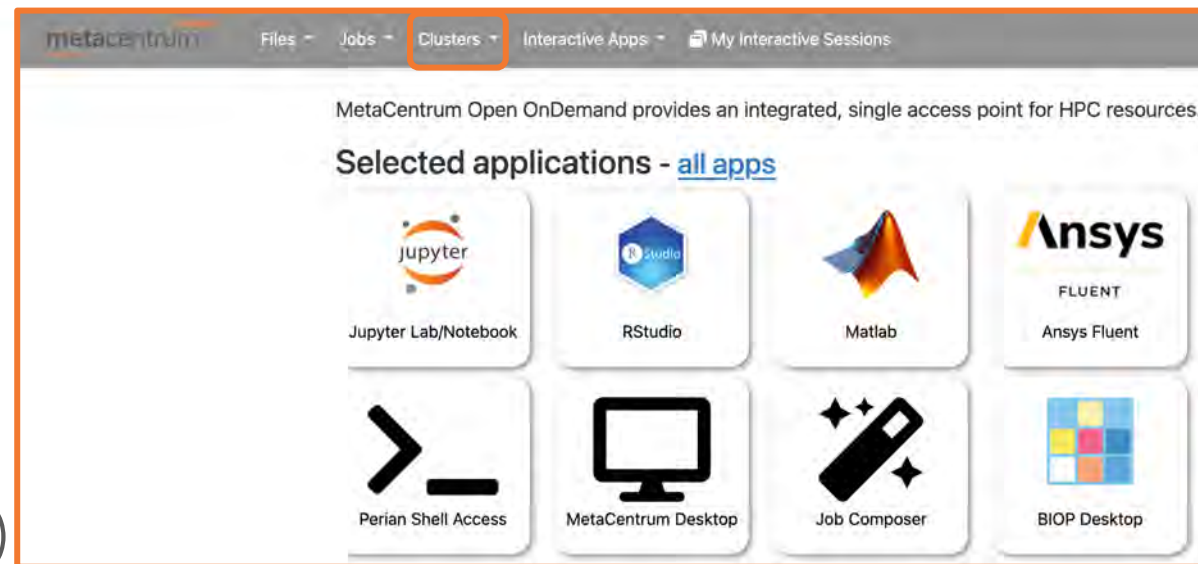
☐	Type	Name		Size	Modified at
☐	Folder	03_E_nip_genom		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	03_E_nip_trans		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	04_Viremie_AV_Kapr_Karas		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	04_Viremie_AV_Plotice_Cejn		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	05_Nikol_Kmentova		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	06_Kasa_mansoni_hepatica_vejce		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	07_Haem_cont_metylaceDNA		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	Folder	08_JI_hetero_trans		-	28. 9. 2025 11:11:36
☐	File	01_Echo.tar.gz		662.80 GB	9. 10. 2022 15:21:53
☐	File	02_TomasPakosta.tar.gz		3.56 GB	14. 11. 2020 18:46:42
☐	File	02_TomasPakosta_posledni_vymysl.zip		13.46 GB	19. 3. 2025 14:40:50
☐	File	Kapentagyryus_July2022.tar.gz		473.75 GB	11. 12. 2023 19:47:56

■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací
- Procházení úložišť (záložka „Files“)
- Příkazová řádka (záložka „Clusters“)

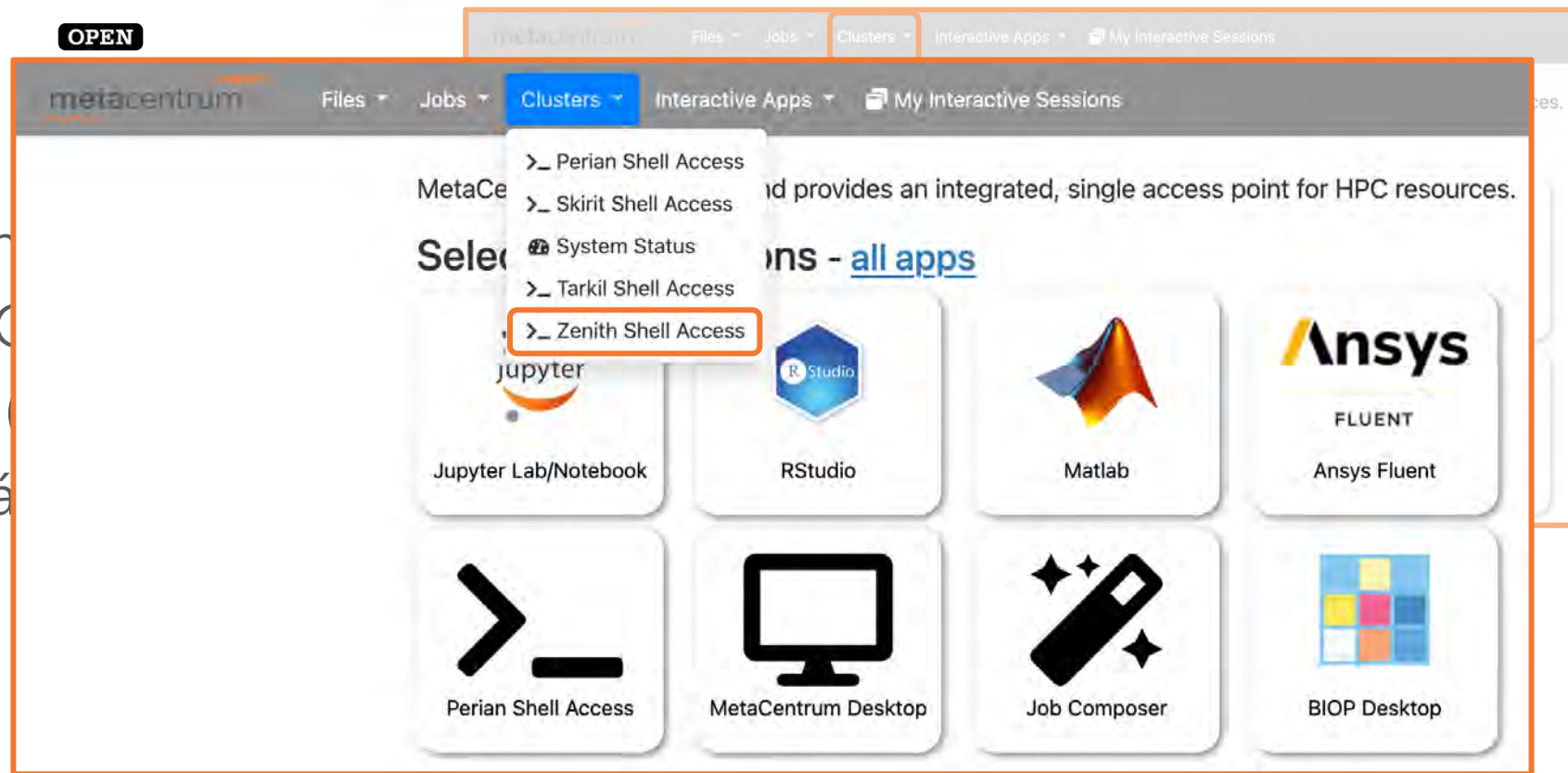
Open OnDemand GUI



■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace n
- Spouštění (nejen) C
- Procházení úložišť
- Příkazová řádka (zá



4 updates could not be installed automatically. For more details,
see /var/log/unattended-upgrades/unattended-upgrades.log
Last login: Sun Sep 28 11:25:00 2025 from ondemand.grid.cesnet.cz



Your Home Directories

Avail	DATA	FILES	Backup	Storage
space	quota used	quota used		
558T	none 200G	none 36	snap	brno12-cerit
110T	4.29T 33.9G	2.5M 31.0k	snap	brno2
22T	3.32T 24k	1M 9	full	budejovice1
37T	10.4G 12k	none 8	-	liberec3-tul
403T	4.29T 1.71T	3M 133k	snap	plzen1
64T	7.34G 44k	none 18	-	praha2-natur
235T	5.36T 940G	1.01M 113k	full	praha5-elixir
69T	7.34G 32k	none 12	full	pruhonice1-ibot
12T	2.14T 80k	2M 33	snap	vestec1-elixir

CPUs

Free	Used	Total	Centre
7923	27738	35661	META

Contact

E-mail: meta@cesnet.cz
Web: http://www.metacentrum.cz/

Tip of the day: Have you ever heard about a Chipster? Chipster is a web-based interactive analysis software for NGS and microarray data. More information at <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/related/chipster>.

```
(BOOKWORM)vorel@zenith:~$ pwd
/storage/brno12-cerit/home/vorel
(BOOKWORM)vorel@zenith:~$ qstat -u vorel
```

pbs-m1.metacentrum.cz:

Job ID	Username	Queue	Jobname	SessID	NDS	TSK	Req'd Memory	Req'd Time	Elap S	Time
13264531.pbs-m1.met*	vorel	interac*	STDIN	40155	1	1	400mb	18:00	R	00:11
13264536.pbs-m1.met*	vorel	interac*	STDIN	49799	1	1	400mb	18:00	R	00:00

(BOOKWORM)vorel@zenith:~\$

Themes: Tomorrow

Default

Bright

CLRS

Github

Solarized Light

Tomorrow

Dark

Cobalt2

idleToes

Monokai Remastered

Pastel Dark

Red Alert

Tomorrow Night Blue

Tomorrow Night Bright

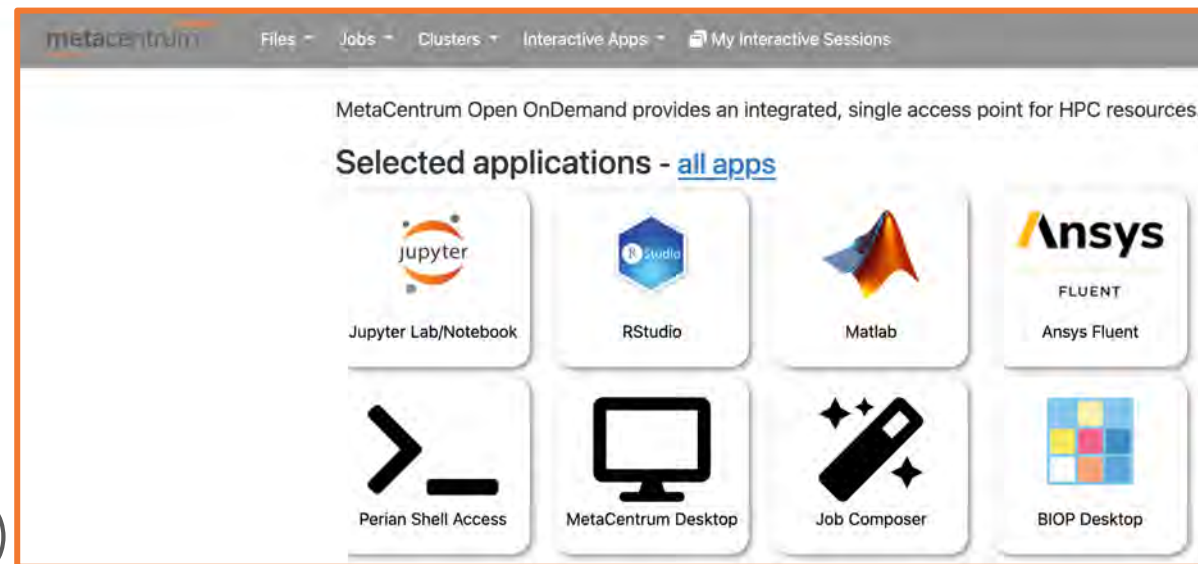
Tomorrow Night Eighties

Tomorrow Night

■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací
- Procházení úložišť (záložka „Files“)
- Příkazová řádka (záložka „Clusters“)
- Vytvořit a odeslat dávkovou úlohy (záložka „Jobs - Job Composer“)



■ Open OnDemand

https://o

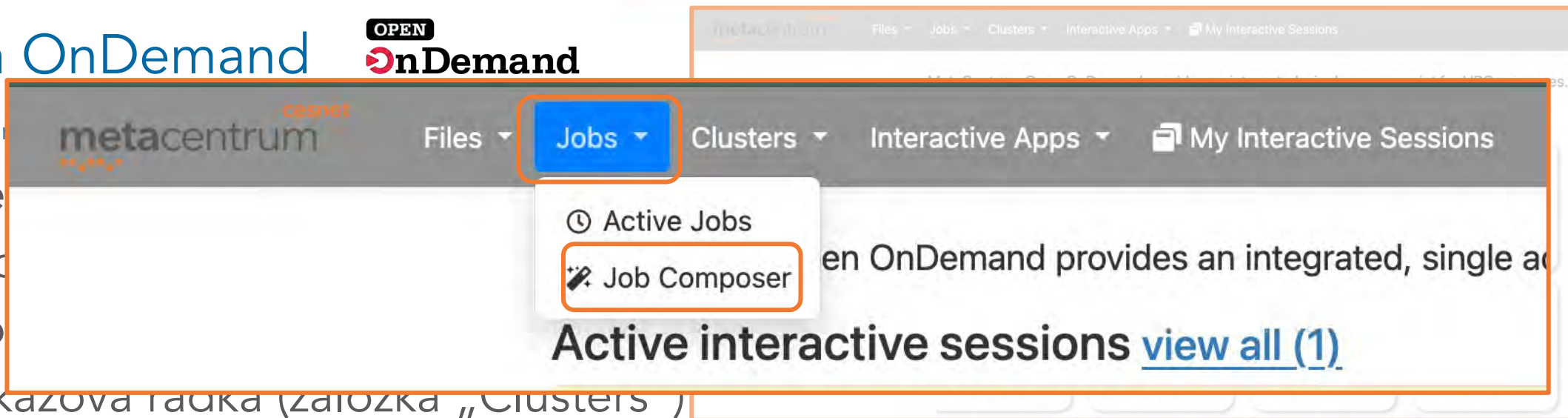
■ We

■ Sp

■ Pro

■ Příkazová řádka (záložka „Clusters“)

■ Vytvořit a odeslat dávkovou úlohy (záložka „Jobs - Job Composer“)



Jobs

New Job

Exit FilesJob OptionsOpen TerminalSubmitCancel

☆ Create TemplateDelete

Show 25 entries

Created

Name

ID

Cluster

Status

October 1, 2025 2:07pm

(default) Metacentrum simple sequential job

Perian

Not Submitted

Showing 1 to 1 of 1 entries

Previous1Next

Job Details

Job Name:
(default) Metacentrum simple sequential job

Submit to:
Perian

Account:
Not specified

Script location:
/storage/brno2/home/vorel/ondemand/data/sys/myjobs/projects/default/1

Script name:
main_job.sh

Folder Contents:
main_job.sh

Submit Script

main_job.sh

Script contents:
#PBS -N hello_world
#PBS -l ncpus=1
#PBS -l walltime=24:00:00
#PBS -l mem=400mb
#PBS -j oe
##PBS -l scratch_local=1g

cd \$PBS_O_WORKDIR
echo "Hello World" > output_file

echo "Created output_file with 'Hello World'"

Open Editor

Open TerminalOpen PDF

/storage/brno2/home/vorel/ondemand/data/sys/myjobs/projects/default/1/main_job.sh

 Save

Key Bindings

Default

Font Size

12px

Mode

Text

Theme

Solarized Light

Wrap

☐

```

1 #PBS -N hello_world_test
2 #PBS -l ncpus=1
3 #PBS -l walltime=1:00:00
4 #PBS -l mem=1gb
5 #PBS -j oe
6 ##PBS -l scratch_local=1g
7
8 cd $PBS_O_WORKDIR
9 echo "Hello World" > output_file
10
11 echo "Created output_file with 'Hello World'"

```

Job was successfully submitted.

Jobs

+ New Job ▾

☆ Create Template

Edit Files

Job Options

Open Terminal

Submit

Stop

Delete

Show 25 ▾ entries

Search:

Created	Name	ID	Cluster	Status
October 1, 2025 2:07pm	(default) Metacentrum simple sequential job	13351946.pbs-m1.metacentrum.cz	Perian	Completed

Job was successfully submitted.

Jobs

+ New Job

☆ Create Template

Edit FilesJob OptionsOpen Terminal

SubmitDropDelete

Show 25 entries

Search:

Created	Name	ID	Cluster	Status
October 1, 2025 2:07pm	(default) Metacentrum simple sequential job	13351946.pbs-m1.metacentrum.cz	Perian	Completed

Showing 1 to 1 of 1 entries

Previous1Next

Job Details

13351946.pbs-m1.metacentrum.cz

Job Name:

(default) Metacentrum simple sequential job

Submit to:

Perian

Account:

Not specified

Script location:

/storage/brno2/home/vorel/ondemand/data/sys/myjobs/projects/default/1

Script name:

main_job.sh

Folder Contents:

hello_world_test.o13351946

main_job.sh

output_file

/storage/brno2/home/vorel/ondemand/data/sys/myjobs/projects/default/1/output_file

Save

Key Bindings

Default

Font Size

12px

Mode

Text

Theme

Solarized Light

Wrap

☐

```

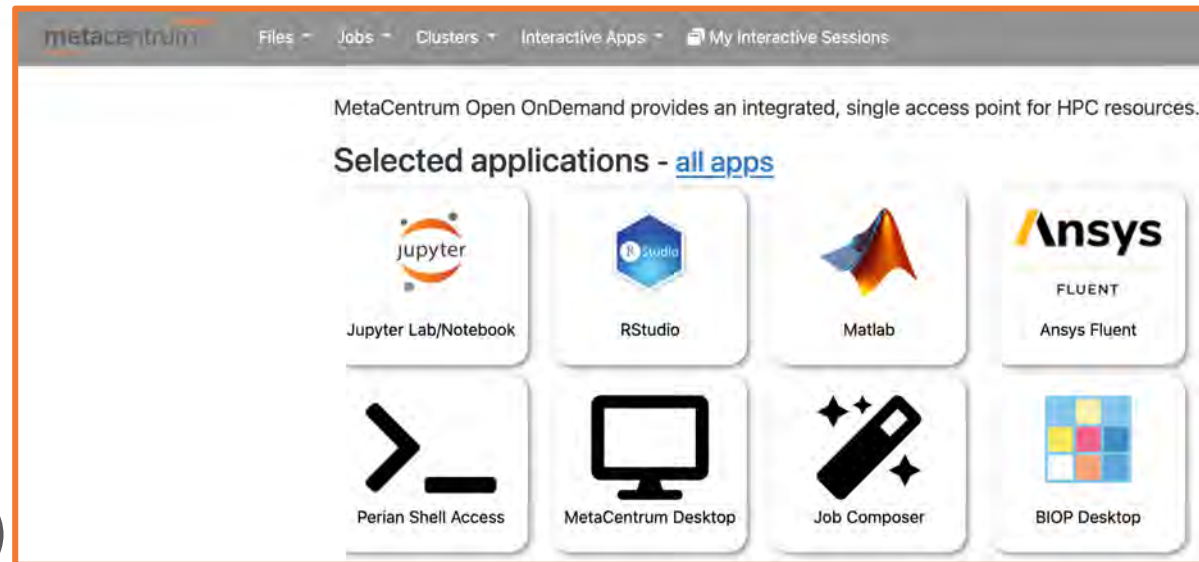
1 Hello World
2

```


■ Open OnDemand

<https://ondemand.metacentrum.cz/>

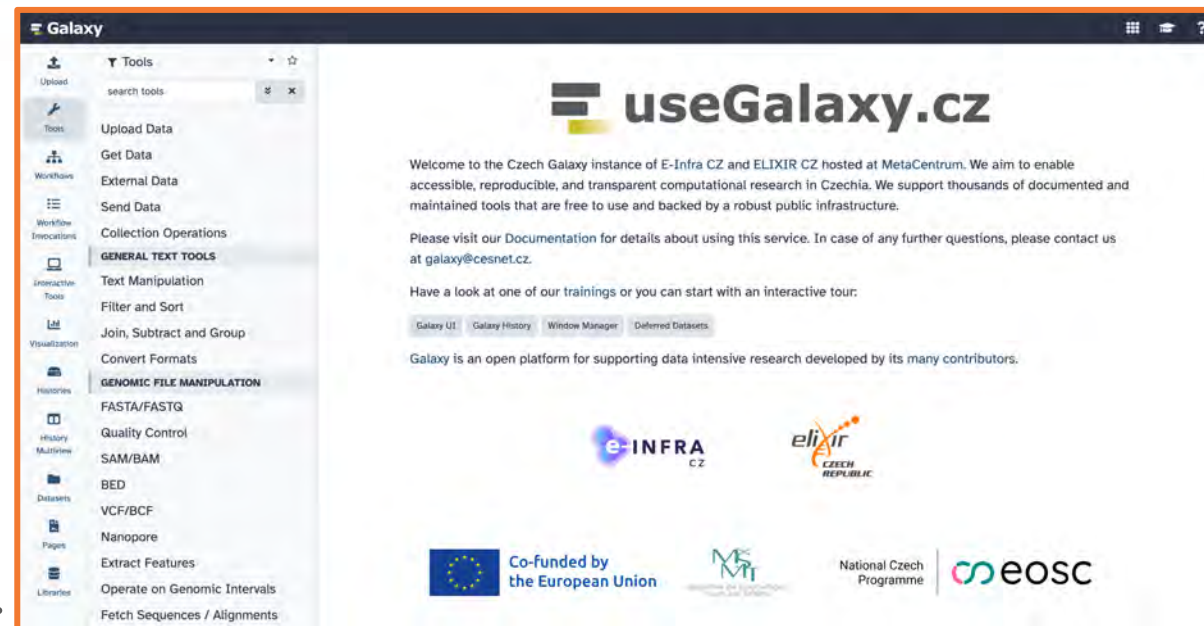
- Webová aplikace nad OpenPBS
- Spouštění (nejen) GUI aplikací
- Procházení úložišť (záložka „Files“)
- Příkazová řádka (záložka „Clusters“)
- Vytvořit a odeslat dávkovou úlohy (záložka „Jobs - Job Composer“)
- Plánovaná možnost spouštění virtuálních strojů (OpenStack) a Docker obrazů (Kubernetes on OpenStack)



■ Galaxy useGalaxy.cz

<https://usegalaxy.cz/>

- Národní instance e-INFRA CZ a VI Elixir CZ, hostuje MetaCentrum
- Webová aplikace nad OpenPBS
- Systém pro komplexní analýzu dat, tvorbu a sdílení workflow, výuku atd.
- Zpracování „-omických“ dat, LLM, ML, materiálové vědy, ekologie, chemie, statistické analýzy, humanitní studie, atd.
- Uživatel se nestará o rezervaci HW




Upload


Tools


Workflows


Workflow Invocations


Interactive Tools


Visualization


Histories


History Multiview


Datasets


Pages


Libraries

Tools

search tools

Upload Data

Get Data

External Data

Send Data

Collection Operations

GENERAL TEXT TOOLS

Text Manipulation

Filter and Sort

Join, Subtract and Group

Convert Formats

GENOMIC FILE MANIPULATION

FASTA/FASTQ

Quality Control

SAM/BAM

BED

VCF/BCF

Nanopore

Extract Features

Operate on Genomic Intervals

Fetch Sequences / Alignments

GENOMICS ANALYSIS

Assembly

 useGalaxy.cz

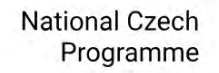
Welcome to the Czech Galaxy instance of [E-Infra CZ](#) and [ELIXIR CZ](#) hosted at [MetaCentrum](#). We aim to enable accessible, reproducible, and transparent computational research in Czechia. We support thousands of documented and maintained tools that are free to use and backed by a robust public infrastructure.

Please visit our [Documentation](#) for details about using this service. In case of any further questions, please contact us at galaxy@cesnet.cz.

Have a look at one of our [trainings](#) or you can start with an interactive tour:

- Galaxy UI
- Galaxy History
- Window Manager
- Deferred Datasets

Galaxy is an open platform for supporting data intensive research developed by its [many contributors](#).



Galaxy

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Interactive Tools

Visualization

Histories

History Multiview

Datasets

Pages

Libraries

Tools

search tools

Upload Data

Get Data

External Data

Send Data

Collection Operations

GENERAL TEXT TOOLS

Text Manipulation

Filter and Sort

Join, Subtract and Group

Convert Formats

GENOMIC FILE MANIPULATION

FASTA/FASTQ

Quality Control

SAM/BAM

BED

VCF/BCF

Nanopore

Extract Features

Operate on Genomic Intervals

Fetch Sequences / Alignments

GENOMICS ANALYSIS

Assembly

Upload from Disk or Web to **Unnamed history**

Regular

Composite

Collection

Rule-based

Drop files here

Type (set all): Auto-detect

Q Reference (set all): unspecified (?)

Choose local file

Choose remote files

Paste/Fetch data

Start

Pause

Reset

Close

Co-funded by the European Union

Ministry of Education, Youth and Sports

National Czech Programme

eosc

Galaxy

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Interactive Tools

Visualization

Histories

History Multiview

Datasets

Pages

Libraries

Tools

search tools

Upload Data

Get Data

External Data

Send Data

Collection Operations

GENERAL TEXT TOOLS

Text Manipulation

Filter and Sort

Join, Subtract and Group

Convert Formats

GENOMIC FILE MANIPULATION

FASTA/FASTQ

Quality Control

SAM/BAM

BED

VCF/BCF

Nanopore

Extract Features

Operate on Genomic Intervals

Fetch Sequences / Alignments

GENOMICS ANALYSIS

Assembly

Upload from

Regular

search

×

Label

Details

FTP Directory

Galaxy User's FTP Directory

InvenioRDM TESTING

Testing instance of Invenio, content is NOT preserved and DOIs created in this instance are not real.

Zenodo TESTING

Testing instance of Zenodo, content is NOT preserved and DOIs created in this instance are not real.

Zenodo

Zenodo is a general-purpose open-access repository. For each submission, a DOI is created, making items easily citeable.

Create a new remote file source

+ Create new

×

Cancel

✓

Select

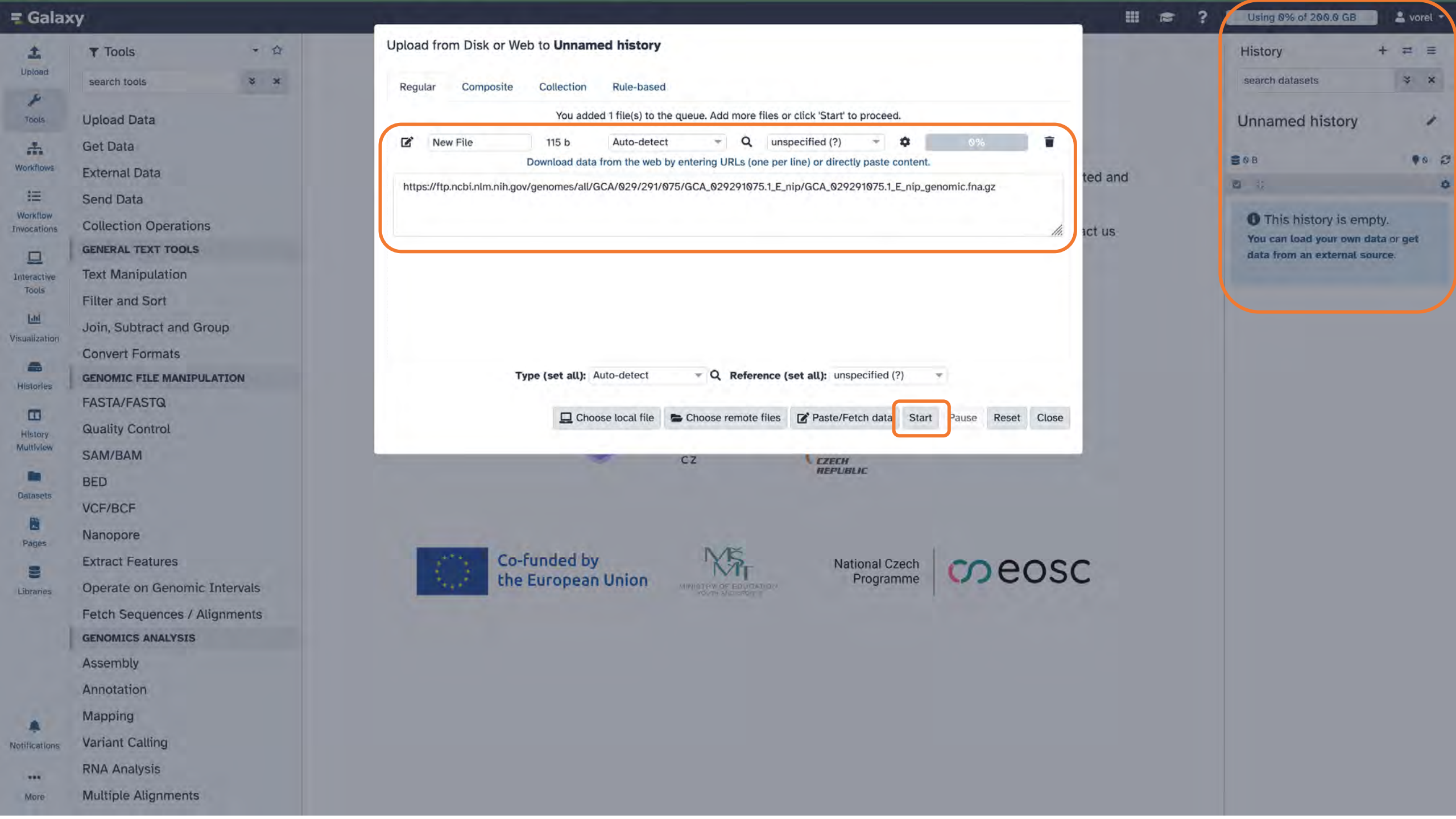
Co-funded by the European Union

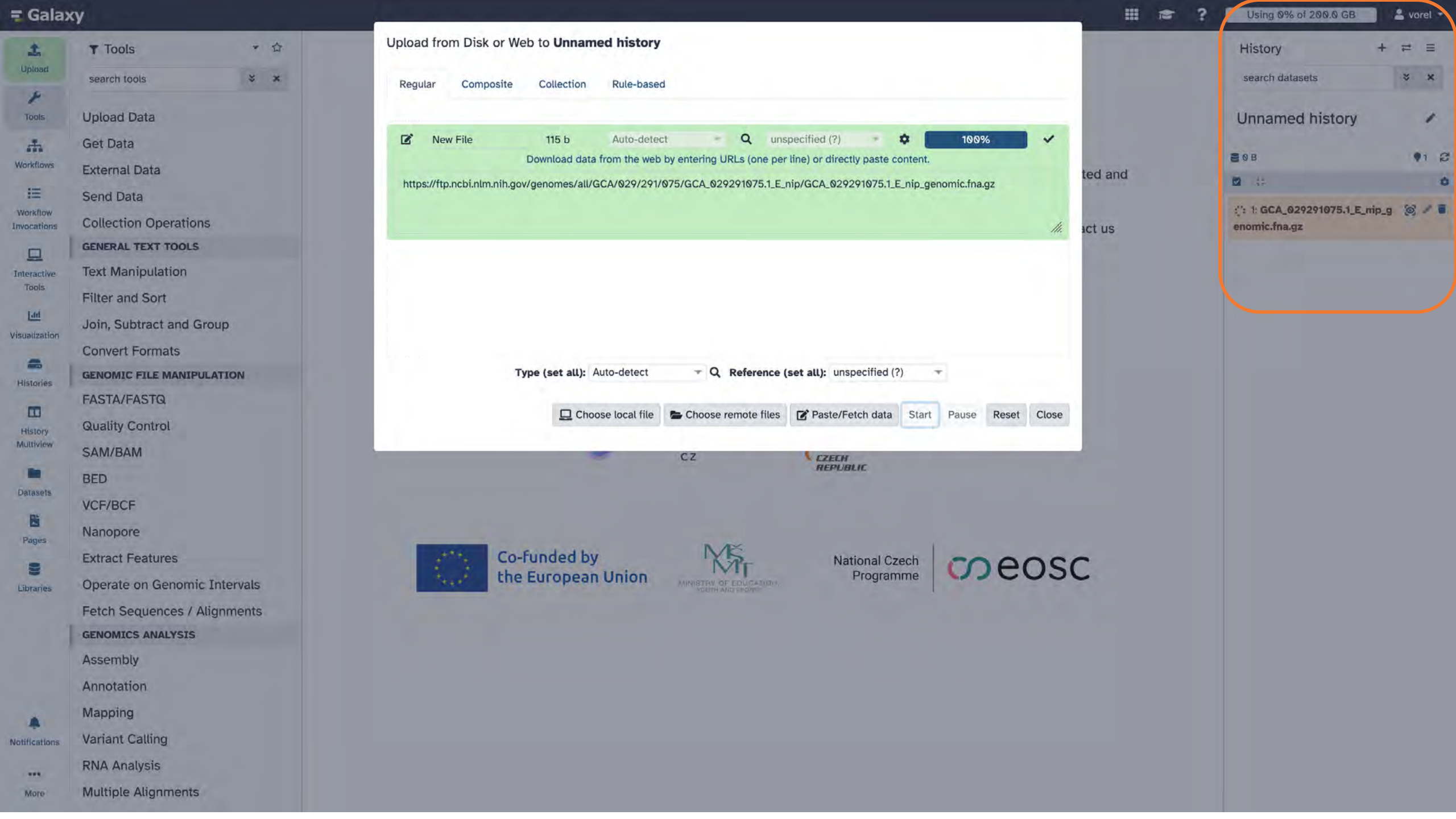
MSMT

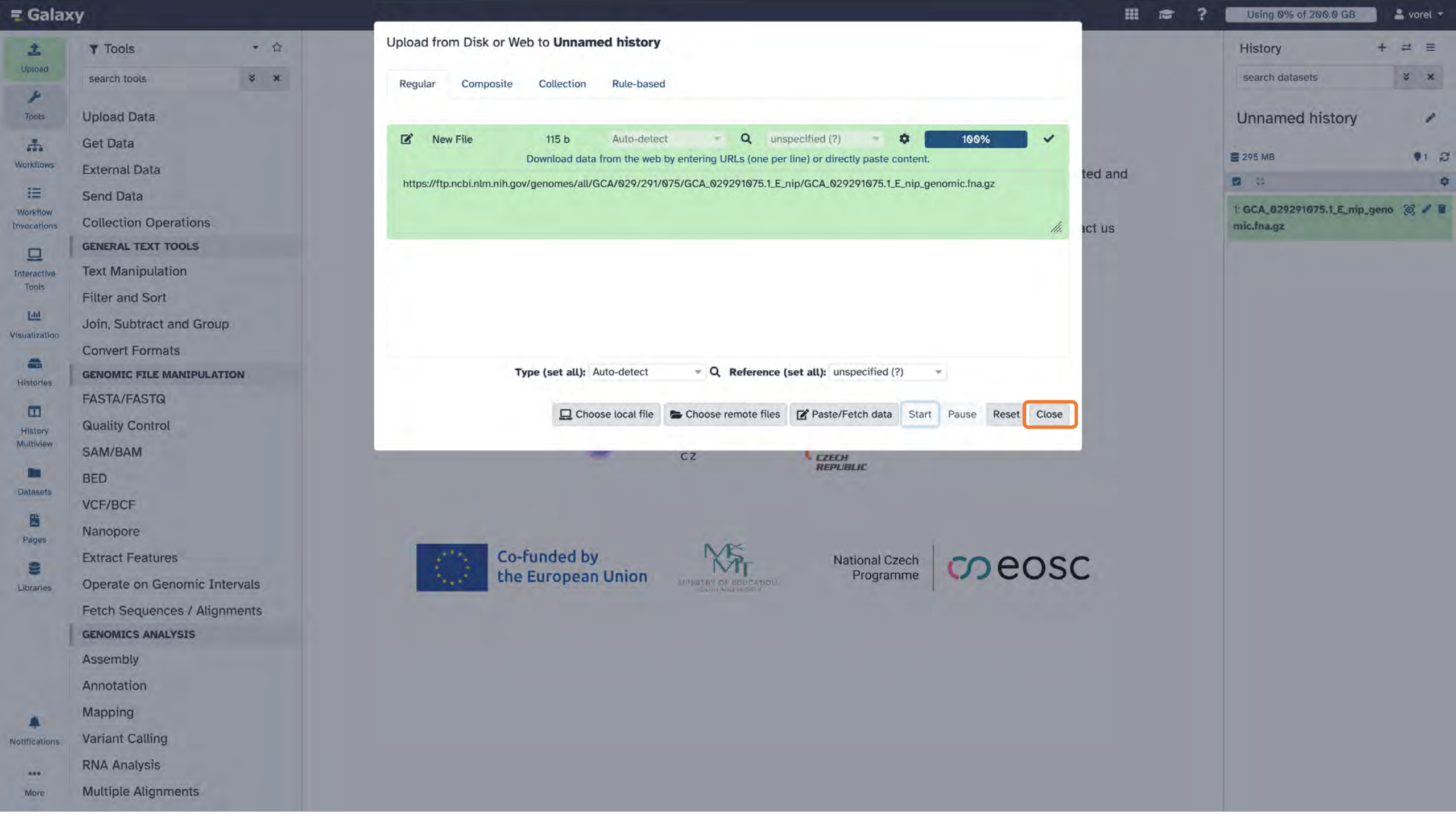
MINISTRY OF EDUCATION
YOUTH AND SPORTS

National Czech Programme

eosc







[illegible]

1: GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

ok

21,044 sequences

format **fasta.gz** database ? size **281.4 MB**

Preview

Visualize

Details

Edit

This dataset is large and only the first megabyte is shown below.

Show all | Save

>JAQBSW010000001.1 Eudiplozoon nipponicum isolate JV_EN_01 E_nip_1, whole genome shotgun sequence

gcaatgttctctcattcgagtaattaacgcgtctggctgatcggcctacgtaagttgatcgacaacttgcgatgtatctt
ggtaaaaaatattgatattgacattaacgactgtttctcttggattactggtaaaaggcaagtggttacactaataaac
actcgtagtttagctgcattaaatgctgttaatgctgcttcaactttcttttggctcattcgggaactgcatccac
cataaatgggagtggttaggtagaccgtttctttctggcgttaataagctgtttctgttgattcctcttttaataat
tgattcaatataagtCTAGGATaccattagacattaaatcgtaattgctttattatataattttctttagaatatt
gactaaccaacctgtcaattcttaaaaaagcaaccacgaactgttgataatttatattgaatggtaaaaaactgctgtat
aacaataactgtgcagaccatgttggttatggtaaatgttctgtttaatttaccattagtttttcatataatagtata
tctaggaaaggcagacagtcattcttctcgctctgtcgtgaagccgatattcttatgtgctttgttgaaactttaag
taattgtcgtgattgcgacctgttcttaagtacaagaatatatcatccacgtaccgtatatattgagcacatttaatta
tgtattttctaggcgccctagaaaaatctcagccaacactggagataaggggcttccattgagacaccatttcattaat
tactttgcgctccacctgtctatttcatctgatttatcgctagacgtgtgaattttgtattgcatttaaacacgtttct
catcttttgcagtgatgcagattgttgcattataaagtgcgctctttcttttgcgttcttgacttaagaacagggtcgcaa
tcacgaacattgtctcaaggtttcaacaagcacataagaatatcggtctcagctcggaagcagagaaagatgactgtct
gcctttcttagatgtactattaaagaaagaactaatggtaacttaaacagaaacatttaccataaaccaacatggctcg
cacagatattgcataaacgagcttttgcgtatttaaacataaattatcaacagttcgtggttctttcaagaatagac
agggtgggttagtcaagattctaagaataatgaatataataaagcaattaacggtttaattgtctaatggctatccagaca
atatttgatcaattcaattataaaaggggagtttaaccagaaacagacgtattatgggcccagaaagaaataagttctaccta
acataccatttaagggggatgcagctctccgaatggcacaaaagaaagatgaagcagcattgacacacacatttaattgca
gccaactacgagtgattatttagggtaacacacttgcctttactagcaatcaagagaaacagccggttaattgtcgatatc
aatattatttaccaatatgcattgcgcatgttgcgtcaacttacgtaggccgatcgaccagacgggttaattactcgaa
tgagagaacattgcaacttaaaccccggttttaaatcaantggtagaatacagctgtgctatttgcgaacacatcatcgaa
gcatcgacagtgattgttctcagacgtagcattcaagtaattactaaatgcaaaacaaaaggagctagccacattatgg
ataaacaatttgcagccggatttatgcaagcagaagaagcacgtacaagcattgagcctgaactggatgtgaggcacgca
atttgattgggttctcggtgttccacctctctctatgttcacatatttctatcttgttttgcctttcaatttatataaaa
atatgttcattagaagatattcagaagacaatgcgaagaaaaatttctgtactgatataaattcaattttatttgcata
tagGCTCTTATGGAAACTAAGCTATAGGTGACATAGTTTCGCTGTTTACGATGCAACATTGATGTAGGCGAAATCGTGGC
AAAGAAAAGCGTGTAGGATGTTACCGTGTGTTATGAATGCTTAAGCACTGCTTGGTAAATAGGAAGGTGTTGTACCAAT
CGAACCCCTAGTTATTTCCAGGAACCTCGGGAACACGAGCAGCAACTTTATGGTGTCCTACCTGGAAGAAAAGTATGACGCCA
ACATAGGCAACCTTCAATTAGTCTATAAATCAACAATaatgtcatttttataattaaacgaacattgtttgcgaggcg
atcATAACCTTttttataaactcagggttgcgaacttgttataaaaacctgaccattaaagttctAAAAATTAGTCATTATA
ATCTAAGattttagttagttagaaaaggcaattcaccagtagaccggtttcgttcttattgggaactcatcatgtactggc
ctgtgtagcatcatttagccgttaagttcgaactaaccatccacaatctgtcattaaacgaAAGGATACTACGTTATATG
GGGAAATTGGGatagttatttggaaactttagcgCTAAATGGATGATATATAGGCTCTACacaaaggaaagactaaccgaag
acgcatagttagtatataactgaaaattgtgcgtagtttgCGGCACAGTGACTcggtagttagagcaccacattcggaa
acagacgttccaggttcgcgCCTGACCGcttcaaatctggcaagtacatgaggagttctcaataaggacgaatccgg
tctactggacgaattgcgttttctacactgtacaattcttagtttatactgcgaatgtatgcacttaattggatcagggtga
tcatatcaaggttcgaaccttgatataaatttatgTCATTTTGCTACTCAGTGTATGCAACATATTTTATCATCGTTTCC
TCACTATTTAACC CGCAAGAAACAATTGACACAGTAGAAAAAAGATCAGctaaaaattattagaaaattatagaaa
catgcataaaaaataaatagctcATCACGAGAACACGCTGCCTATCCGATTTAAGTGACTGAGCAAAATTGTATGCAC

Galaxy

Using 0% of 200.0 GB

vorel

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Interactive Tools

Visualization

Histories

History Multiview

Datasets

Pages

Libraries

Notifications

More

Tools

statistics

Show Sections

Statistics on presence-absence of a numeric variable

Summary Statistics for any numerical column

FASTQ Summary Statistics by column

Fasta Statistics display summary statistics for a FASTA file

SeqKit statistics of FASTA/Q files

Compute quality statistics

Genome annotation statistics

Read length statistics from a set of FAST5 files

BAM Index Statistics

Stacks: statistics on stacks found for multiple samples

MiModD Coverage Statistics calculates coverage statistics for a BCF file as generated by the MiModd Variant Calling tool

ProteomIQon PSMStatistics utilizes semi supervised machine learning techniques to integrate search engine scores as well as the mentioned quality scores into one single consensus score.

MapStatistics Extract extended statistics on the features of a map for quality control

zonal statistics over each area

Boxplot of quality statistics

Dr. Disco (classify) Classifies detected break-points in RNA-seq based on corresponding statistics and blacklists

cmstat Summary statistics for covariance model

BAM/SAM Mapping Stats reads mapping statistics for a provided BAM or SAM file.

1:renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

ok

21,044 sequences

format **fasta.gz**

database ?

size **281.4 MB**

Preview

Visualize

Details

Edit

Edit Dataset Attributes

Attributes

Datatypes

Permissions

Name

renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

Info

My genome file

Annotation - optional

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Nullam justo enim, consectetur nec, ullamcorper ac, vestibulum in, elit. Maecenas aliquet accumsan leo.

Add an annotation or notes to a dataset; annotations are available when a history is viewed.

Database/Build - optional

unspecified (?)

Save

Auto-detect

History

search datasets

Unnamed history

Annotation (optional)

Add Tags

Save

Cancel

295 MB

1

1:renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

Galaxy

Using 0% of 200.0 GB

vorel

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Interactive Tools

Visualization

Histories

History Multiview

Datasets

Pages

Libraries

Notifications

More

Tools

statistics

Show Sections

Statistics on presence-absence of a numeric variable

Summary Statistics for any numerical column

FASTQ Summary Statistics by column

Fasta Statistics display summary statistics for a FASTA file

SeqKit statistics of FASTA/Q files

Compute quality statistics

Genome annotation statistics

Read length statistics from a set of FAST5 files

BAM Index Statistics

Stacks: statistics on stacks found for multiple samples

MiModD Coverage Statistics calculates coverage statistics for a BCF file as generated by the MiModd Variant Calling tool

ProteomIQon PSMStatistics utilizes semi supervised machine learning techniques to integrate search engine scores as well as the mentioned quality scores into one single consensus score.

MapStatistics Extract extended statistics on the features of a map for quality control

zonal statistics over each area

Boxplot of quality statistics

Dr. Disco (classify) Classifies detected break-points in RNA-seq based on corresponding statistics and blacklists

cmstat Summary statistics for covariance model

BAM/SAM Mapping Stats reads mapping statistics for a provided BAM or SAM file.

1: renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

21,044 sequences

format fasta.gz database ? size 281.4 MB

Preview Visualize Details Edit

Edit Dataset Attributes

Attributes Datatypes Permissions

Name

renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

Info

My genome file

Annotation - optional

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Nullam justo enim, consectetur nec, ullamcorper ac, vestibulum in, elit. Maecenas aliquet accumsan leo.

Add an annotation or notes to a dataset; annotations are available when a history is viewed.

Database/Build - optional

unspecified (?)

Save Auto-detect

History

search datasets

Unnamed history

Annotation (optional)

Add Tags

Save Cancel

295 MB

1

1: renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz

Y Tools

statistics

🔍

✕

🔗 Show Sections

Statistics on presence-absence of a numeric variable

Summary Statistics for any numerical column

FASTQ Summary Statistics by column

Fasta Statistics display summary statistics for a FASTA file

SeqKit statistics of FASTA/Q files

Compute quality statistics

Genome annotation statistics

Read length statistics from a set of FAST5 files

BAM Index Statistics

Stacks: statistics on stacks found for multiple samples

MiModD Coverage Statistics calculates coverage statistics for a BCF file as generated by the MiModd Variant Calling tool

ProteomIQon PSMStatistics utilizes semi supervised machine learning techniques to integrate search engine scores as well as the mentioned quality scores into one single consensus score.

MapStatistics Extract extended statistics on the features of a map for quality control

zonal statistics over each area

Boxplot of quality statistics

Dr. Disco (classify) Classifies detected break-points in RNA-seq based on corresponding statistics and blacklists

cmstat Summary statistics for covariance model

BAM/SAM Mapping Stats reads mapping statistics for a provided BAM or SAM file.

Fasta Statistics

display summary statistics for a FASTA file (Galaxy Version 2.0)

☆ ▾▶ Run Tool

Tool Parameters

FASTA or Multi-FASTA file *

📄 📄 📁 ...

Select a dataset

accepted formats ▾

1: renamed_GCA_029291075.1_E_nip_genomic.fna.gz (as fasta) ✓

FASTA dataset to get stats from

Estimated genome size - optional

This parameter is optional. If provided, it will be used for calculating the NG50 statistic. (--genome_size)

Generate gap stats

No

(--gaps_option)

Additional Options

Email notification

No

Send an email notification when the job completes.

Attempt to re-use jobs with identical parameters?

No

This may skip executing jobs that you have already run.

▶ Run Tool

Help

i Purpose

Displays the summary statistics for a FASTA file.

i Outputs

This tool generates two outputs: a general summary and an optional gap stats file.

The general summary includes the following information:

- Lengths: n50, min, max, median and average
- Number of base pairs: A, C, G, T, N, Total and TotalNotN
- Number of sequences
- GC content

In addition the optional gap stats BED file includes the information about gaps localization.

History

+

↺

≡

search datasets

⌵

✕

Unnamed history

✎

Unnamed history

Annotation (optional)

Add Tags

🏷️

Save

↺ Cancel

295 MB

📍 1

🔄

☑️

📄 📄

⚙️

1: renamed_GCA_029291075.1_E
_nip_genomic.fna.gz

🔍 ✎ 🗑️

✓ Started tool **Fasta Statistics** and successfully added 1 job to the queue.

It produces this output:

- **2: Fasta Statistics on data 1: summary stats**

You can check the status of queued jobs and view the resulting data by refreshing the History panel. When the job has been run the status will change from 'running' to 'finished' if completed successfully or 'error' if problems were encountered.

Here is a link to the job: [83e4c30195971270](#)

History

search datasets

Unnamed history

Unnamed history

Annotation (optional)

Add Tags

Save

Cancel

295 MB

2

1

2: Fasta Statistics on data 1:

summary stats

1: renamed_GCA_02929107

5.1_E_nip_genomic.fna.gz

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Interactive Tools

Visualization

Histories

History Multiview

Datasets

Pages

Libraries

Notifications

More

Tools

statistics

Show Sections

Statistics on presence-absence of a numeric variable

Summary Statistics for any numerical column

FASTQ Summary Statistics by column

Fasta Statistics display summary statistics for a FASTA file

SeqKit statistics of FASTA/Q files

Compute quality statistics

Genome annotation statistics

Read length statistics from a set of FAST5 files

BAM Index Statistics

Stacks: statistics on stacks found for multiple samples

MiModD Coverage Statistics calculates coverage statistics for a BCF file as generated by the MiModd Variant Calling tool

ProteomIQon PSMStatistics utilizes semi supervised machine learning techniques to integrate search engine scores as well as the mentioned quality scores into one single consensus score.

MapStatistics Extract extended statistics on the features of a map for quality control

zonal statistics over each area

Boxplot of quality statistics

Dr. Disco (classify) Classifies detected break-points in RNA-seq based on corresponding statistics and blacklists

cmstat Summary statistics for covariance model

BAM/SAM Mapping Stats reads mapping statistics for a provided BAM or SAM file.

Started tool **Fasta Statistics** and successfully added 1 job to the queue.

It produces this output:

2: Fasta Statistics on data 1: summary stats

You can check the status of queued jobs and view the resulting data by refreshing the History panel. When the job has been run the status will change from 'running' to 'finished' if completed successfully or 'error' if problems were encountered.

Here is a link to the job: [83e4c30195971270](#)

History

search datasets

Unnamed history

1.25 GB

2

1

2: Fasta Statistics on data 1: summary stats

1: renamed_GCA_02929107.5.1_E_nip_genomic.fna.gz

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Interactive Tools

Visualization

Histories

History Multiview

Datasets

Pages

Libraries

Notifications

More

Tools

statistics

Show Sections

Statistics on presence-absence of a numeric variable

Summary Statistics for any numerical column

FASTQ Summary Statistics by column

Fasta Statistics display summary statistics for a FASTA file

SeqKit statistics of FASTA/Q files

Compute quality statistics

Genome annotation statistics

Read length statistics from a set of FAST5 files

BAM Index Statistics

Stacks: statistics on stacks found for multiple samples

MiModD Coverage Statistics calculates coverage statistics for a BCF file as generated by the MiModd Variant Calling tool

ProteomIQon PSMStatistics utilizes semi supervised machine learning techniques to integrate search engine scores as well as the mentioned quality scores into one single consensus score.

MapStatistics Extract extended statistics on the features of a map for quality control

zonal statistics over each area

Boxplot of quality statistics

Dr. Disco (classify) Classifies detected break-points in RNA-seq based on corresponding statistics and blacklists

cmstat Summary statistics for covariance model

BAM/SAM Mapping Stats reads mapping statistics for a provided BAM or SAM file.

2: Fasta Statistics on data 1: summary stats

ok

30 lines 2 columns

format tabular database ? size 664 b

Preview

Visualize

Details

Edit

Column 1	Column 2
Scaffold L50	3219
Scaffold N50	87067
Scaffold L90	11600
Scaffold N90	19508
Scaffold len_max	557136
Scaffold len_min	4973
Scaffold len_mean	44658
Scaffold len_median	23894
Scaffold len_std	52885
Scaffold num_A	305506036
Scaffold num_T	305603756
Scaffold num_C	164346741
Scaffold num_G	164346396
Scaffold num_N	0
Scaffold num_bp	939802929
Scaffold num_bp_not_N	939802929
Scaffold num_seq	21044
Scaffold GC content overall	34.97
Contig L50	3219
Contig N50	87067
Contig L90	11600
Contig N90	19508
Contig len_max	557136
Contig len_min	4973
Contig len_mean	44658

History

search datasets

Unnamed history

1.25 GB

2: Fasta Statistics on data 1: summary stats

1: renamed_GCA_02929107 5.1_E_nip_genomic.fna.gz

■ Gridové výpočty (OpenPBS)

- Centrálně spravované HTC/HPC klastry
- Klasické prostředí příkazové řádky (CLI)
- „Nejmocnější“ prostředí
- Dlouhé dávkové úlohy (dny/týdny)
- Interaktivní úlohy (testovací výpočty)
- Paralelní a více uzlové výpočty
- Spouštění kontejnerů (Apptainer), NGC
- GPU akcelerace (NVIDIA H100)
- Disková pole a lokální scratch úložiště

```

cesnet
[BOOKWORM]varel@skirit:~$ echo "MetaCentrum seminar 2025"
MetaCentrum seminar 2025
[BOOKWORM]varel@skirit:~$ █

Your Home Directories
-----
Avail | DATA | FILES | Backup | Storage
space | quota | used | quota | used |
-----
565T  none  200G  none    36   snap  brno12-cerit
113T  4.29T 33.9G  2.5M 31.0k  snap  brno2
22T   3.32T 24k   1M    9    full  budejovice1
37T   10.4G 12k   none   8    -     liberec3-tul
403T  4.29T 1.71T   3M 133k  snap  plzen1
64T   7.34G 44k   none  18    -     praha2-natur
235T  5.36T 940G  1.01M 113k  full  praha5-elixir
70T   7.34G 32k   none  12    full  pruhonice1-ibot
12T   2.14T 80k   2M    33   snap  vestec1-elixir

CPUs
-----
Free   Used   Total   Centre
7034  28627  35661   META

Contact
-----
E-mail:  meta@cesnet.cz
Web:     http://www.metacentrum.cz/

Tip of the day:  You can check allocated/available storage in the table above.

```

- Umíme pustit téměř vše, co neporušuje lic. podmínky a je pro Linux
- Většina aplikačního SW je open source, ale...

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/software>

Placená licence

Pro jednotlivce/s
registrací



Pro všechny
uživatelé/bez
registrace



Neplacená licence

Jak se to správně používá?

- Kdykoliv během roku, manuální schvalování
- Účty jsou platné do 2. 2. následujícího roku, prodlužování účtů v lednu
- Okamžitý přístup k HW zdrojům
- Přístup partnerů po předchozí domluvě (meta@cesnet.cz)
- Přihlášení skrze instituci (tj. místní jméno a heslo) z federace eduID

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/account>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/terms>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/concepts>

The screenshot displays the eduID login page. At the top, there are two main options: 'I have an account in a member organisation of eduID.cz' and 'My organisation is not in eduID.cz and I need to validate my alternative identity'. Below these, a section titled 'Direct links to selected institutions from eduID.cz' lists various universities and research centers, each with its logo and name. The institutions listed are: Masarykova univerzita, Univerzita Karlova, Západočeská univerzita v Plzni, Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích, Univerzita Palackého v Olomouci, Univerzita Pardubice, CESNET, České vysoké učení technické v Praze, Mendelova univerzita v Brně, Mendelova univerzita v Brně, Technická univerzita Liberec, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, and Vysoké učení technické v Brně.

- Kdykoliv během roku, manuální schvalování
- Účty jsou platné do 2. 2. následujícího roku
- Okamžitý přístup k HW zdrojům
- Přístup partnerů po předchozí domluvě (meta@cesnet.cz)
- Přihlášení skrze instituci (tj. místo jméno a heslo) z federace edu

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/account>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/terms>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/concepts>

The screenshot shows the 'Přihlásit účtem' (Login with account) section of the Metacentrum website. A search bar at the top contains the text 'masar'. Below the search bar, a list of institutions is displayed, each with its name and logo:

- Masarykova univerzita (MUNI)
- Masarykova veřejná knihovna Vsetín (NM)
- Masarykův Onkologický Ústav (MOÚ)
- Městská knihovna T.G.Masaryka Šumperk

At the bottom of the list, there are flags representing various countries. In the bottom right corner, there is a 'CESNET' logo and a link to 'Zpracování osobních údajů' (Processing of personal data).

- Kdykoliv během
- Účty jsou platné
- Okamžitý přístup
- Přístup partnerů domluvě (meta@)
- Přihlášení skrze i jméno a heslo) z

<https://docs.metacentrum.cz/en/d>

<https://docs.metacentrum.cz/en/d>

<https://docs.metacentrum.cz/en/d>

MUNI Jednotné přihlášení

učo

376321

Primární heslo

.....

☐ Zapamatovat si mě

PŘIHLÁSIT



You are already registered

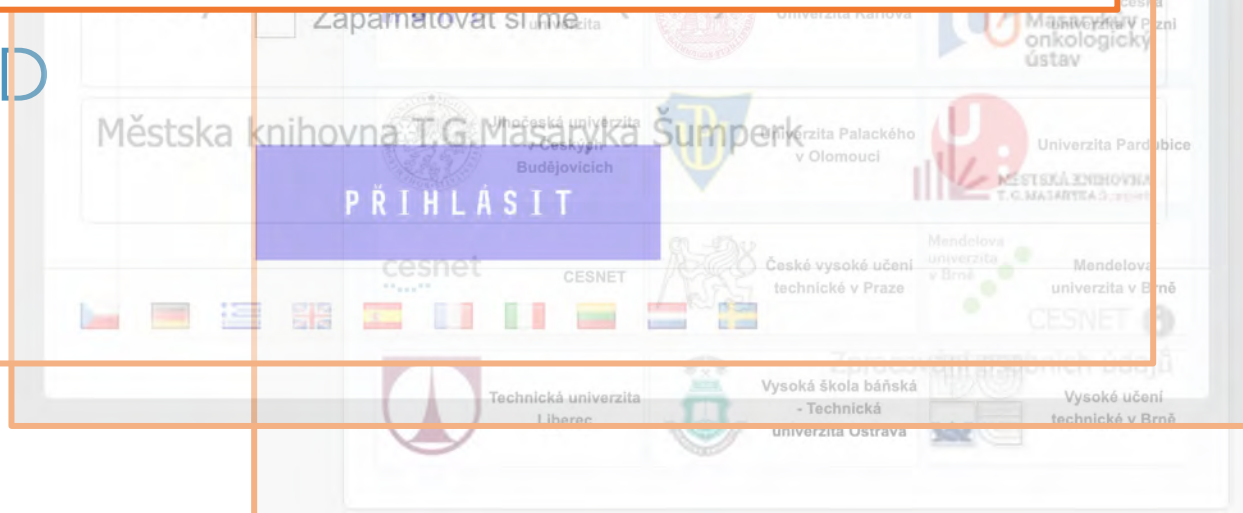
Your membership in *MetaCentrum* is valid until **2026-02-02**.

jméno a heslo) z federace eduID

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/account>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/terms>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/concepts>



<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/infrastructure/frontends>

- Primární přístupový bod
- Přístup SSH protokolem a heslem (vytvoření Kerberos lístku)
 - SSH klíče nejsou podporovány
 - Platný Kerberos lístek umožňuje zadávat úlohy a procházet infrastrukturu
 - Pozor na dlouho otevřená sezení – platnost lístku je 10 hodin

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/log-in#kerberos>



- Pr
- Př

```
(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ klist
Credentials cache: FILE:/tmp/krb5cc_2896_LNqQj5
Principal: vorel@META
```

Issued				Expires				Principal
Oct	1	16:52:54	2025	Oct	2	02:52:54	2025	krbtgt/META@META
Oct	1	16:52:54	2025	Oct	2	02:52:54	2025	afs/ics.muni.cz@META
Oct	1	16:52:54	2025	Oct	2	02:52:54	2025	krbtgt/ZCU.CZ@META
Oct	1	16:52:54	2025	Oct	2	02:52:54	2025	afs/zcu.cz@ZCU.CZ

```
(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ qstat -u vorel
```

```
pbs-m1.metacentrum.cz:
```

Job ID	Username	Queue	Jobname	SessID	NDS	TSK	Req'd Memory	Req'd Time	Elap S	Time
13361052.pbs-m1.met*	vorel	interac*	STDIN	492825	1	1	400mb	18:00	R	00:00

```
(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ cd /storage/brno12-cerit/home/vorel
(BOOKWORM)vorel@nympha:/storage/brno12-cerit/home/vorel$ pwd
/storage/brno12-cerit/home/vorel
(BOOKWORM)vorel@nympha:/storage/brno12-cerit/home/vorel$
```

cesnet
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~\$ klist

Čekání (frontend server)

```
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ kdestroy  
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ klist  
klist: No ticket file: /tmp/krb5cc_2896_qFIu11  
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ qstat -u vorel  
pbs_gss_establish_context: GSS - gss_acquire_cred : No credentials were supplied, or the credentials were unavailable or inaccessible.  
pbs_gss_establish_context: GSS - gss_acquire_cred : unknown mech-code 0 for mech unknown  
auth: error returned: 15010  
auth: auth_process_handshake_data failure  
Permission denied  
qstat: cannot connect to server pbs-m1.metacentrum.cz (errno=15010)  
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ cd /storage/brno2/home/vorel/  
-bash: cd: /storage/brno2/home/vorel/: Key has expired  
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ qsub -I  
pbs_gss_establish_context: GSS - gss_acquire_cred : No credentials were supplied, or the credentials were unavailable or inaccessible.  
pbs_gss_establish_context: GSS - gss_acquire_cred : unknown mech-code 0 for mech unknown  
auth: error returned: 15010  
auth: auth_process_handshake_data failure  
Permission denied  
qsub: cannot connect to server pbs-m1. (errno=15010)  
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ kinit  
vorel@META's Password: █
```

```
[(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ cd /storage/brno12-cerit/home/vorel  
[(BOOKWORM)vorel@nympha:/storage/brno12-cerit/home/vorel$ pwd  
/storage/brno12-cerit/home/vorel  
(BOOKWORM)vorel@nympha:/storage/brno12-cerit/home/vorel$ █
```



<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/infrastructure/frontends>

- Primární přístupový bod
- Přístup SSH protokolem a heslem (vytvoření Kerberos lístku)
 - SSH klíče nejsou podporovány <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/log-in#kerberos>
 - Platný Kerberos lístek umožňuje zadávat úlohy a procházet infrastrukturu
 - Pozor na dlouho otevřená sezení – platnost lístku je 10 hodin
 - Kerberos lístky lze generovat na lokálním PC a přihlašovat se bez hesla <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/security/kerberos>



■ Primární přístup

■ Přístup SSH prot

- SSH klíče nejsou
- Platný Kerberos
- Pozor na dlouh
- Kerberos lístky

Frontend address	Aliased as	Native home	OS	Physically located in	Note
charon.nti.tul.cz	charon.metacentrum.cz	/storage/liberec3-tul	Debian 12	Liberec	
elmo.elixir-czech.cz	elmo.metacentrum.cz	/storage/praha5-elixir	Debian 12	Praha	Dedicated to Elixir users
nympha.meta.zcu.cz	nympha.metacentrum.cz, nympha.zcu.cz, minos.zcu.cz, minos.meta.zcu.cz, alfrid.meta.zcu.cz	/storage/plzen1	Debian 12	Plzen	
oven.metacentrum.cz		/storage/brno2	Debian 12	Brno	Reserved to access oven node only
perian.grid.cesnet.cz	perian.metacentrum.cz, onyx.metacentrum.cz	/storage/brno2	Debian 12	Brno	
skirit.ics.muni.cz	skirit.metacentrum.cz	/storage/brno2	Debian 12	Brno	
tarkil.grid.cesnet.cz	tarkil.metacentrum.cz	/storage/praha1	Debian 12	Praha	
tilia.ibot.cas.cz	tilia.metacentrum.cz	/storage/pruhonice1-ibot	Debian 12	Pruhonice	
zenith.cerit-sc.cz	zenith.metacentrum.cz	/storage/brno12-cerit	Debian 12	Brno	

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/infrastructure/frontends>

- Primární přístupový bod
- Přístup SSH protokolem a heslem (vytvoření Kerberos lístku)
 - SSH klíče nejsou podporovány <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/log-in#kerberos>
 - Platný Kerberos lístek umožňuje zadávat úlohy a procházet infrastrukturu
 - Pozor na dlouho otevřená sezení – platnost lístku je 10 hodin
 - Kerberos lístky lze generovat na lokálním PC a přihlašovat se bez hesla
- Nepočítejte na čelních uzlech
 - Jsou to malé virtuální stoje (skirit 32 jader, nympha 16 jader, zenith 8 jader)
 - Hrozí jejich výrazné zpomalení, případně pád
 - Automatické mechanismy ukončující náročné/dlouhé procesy
 - I pro krátké testování výpočtů je vhodnější interaktivní úloha

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/run-basic-job#interactive-job-example>



■ Primární př

■ Přístup SSH

- SSH klíče
- Platný Ker
- Pozor na c
- Kerberos

■ Nepočítejte

- Jsou to m
- Hrozí jejic
- Automatic
- I pro krátk

Dear user,

one or more your processes running on the frontend skirit.ics.muni.cz exceeded limits for more than limits, see below. This situation has negative impact on other users working on the frontend. The following process was terminated by the system.

User:

PID TTY ELAPSED TIME CMD
855050 pts/50 7583 6111 gzip -d

PID - a number representing the process ID on skirit.ics.muni.cz
TTY - controlling tty (terminal)
ELAPSED - elapsed time since the process was started, in seconds
TIME - cumulative CPU time, in seconds
CMD - command with all its arguments

Limits:

>2h wall_time AND >1h cpu_time AND >30% average_cpu_usage

Please consider that frontends are shared among all users. If you need to run interactively some demanding activity, like working with huge amount of data or software compilation, please don't use the frontend but rather reserve some computing node for an interactive jobs. Such operations could slow down the frontend and bother other users.

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/run-basic-job>

Please note this is an automatically generated e-mail. If you have any questions concerning this particular job or future strict limits enforcement, please contact us on meta@cesnet.cz.

Best regards,
MetaCentrum

tend servery)

puting/infrastructure/frontends

lístku)

n/docs/access/log-in#kerberos

nfrastrukturu

n

e bez hesla

zenith 8 jader)

sy

ic-job#interactive-job-example

- K dispozici několik fyzicky oddělených diskových polí
- Určena pro tzv. živá data
 - Zálohy cenných primárních dat a výsledků na objektové úložiště S3/NRP
 - Dostupné všem uživatelům
 - Příkazy *s3cmd/s5cmd* pro manipulaci s daty na S3 úložišti
 - Nutnost požádat o vytvoření S3 bucketu („složky“) a uložit si konfigurační soubor

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/infrastructure/mount-storages>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/data/storage-department>

<https://docs.du.cesnet.cz/en/docs/object-storage-s3/s3-service>



- K dispozici několik fyzicky oddělených diskových polí

Configuring the S3cmd Tool

Add the following lines to the configuration file located at `/home/user/.s3cfg`.

```
[default]
host_base = https://s3.clX.du.cesnet.cz
use_https = True
access_key = xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx
secret_key = xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx
host_bucket = s3.clX.du.cesnet.cz
```

storages

partment

-service



- K dispozici několik fyzicky oddělených diskových polí
- Určena pro tzv. živá data
 - Zálohy cenných primárních dat a výsledků na objektové úložiště S3/NRP
 - Dostupné všem uživatelům
 - Příkazy *s3cmd/s5cmd* pro manipulaci s daty na S3 úložišti
 - Nutnost požádat o vytvoření S3 bucketu („složky“) a uložit si konfigurační soubor
- Uživatelské kvóty jsou nastaveny na celkový objem dat a počet souborů
 - Kapacita úložišť není neomezená
 - Pole jsou různě velká, kvóty se nastavují všem stejně
 - Některá pole mají vlastníky s větší kvótou
 - Problematictější je manipulace s mnoha malými soubory

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/infrastructure/mount-storages>

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/data/storage-department>

<https://docs.du.cesnet.cz/en/docs/object-storage-s3/s3-service>



user	dir	space				files			
		used	soft quota	hard quota	grace	used	soft limit	hard limit	grace
vorel	/storage/brno12-cerit/home/vorel	200.55728 GB	-	-	none	35	-	-	none
vorel	/storage/brno2/home/vorel	40.40222 GB	4294.967296 GB	4294.967296 GB	none	31062	2500000	2550000	none
vorel	/storage/budejovice1/home/vorel	24 kB	3323.625472 GB	5522.30912 GB		9	1000000	1100000	
vorel	/storage/liberec3-tul/home/vorel	12 kB	10.48576 GB	15.72864 GB		8	-	-	
vorel	/storage/plzen1/home/vorel	1714.056364 GB	4294.967296 GB	6442.450944 GB	none	133431	3000000	3100000	none
vorel	/storage/praha2-natur/home/vorel	44 kB	7.340032 GB	10.48576 GB		18	-	-	
vorel	/storage/praha5-elixir/home/vorel	940.99644 GB	5369.757696 GB	6014.107648 GB		113327	1010000	1212000	
vorel	/storage/pruhonice1-ibot/home/vorel	32 kB	7.340032 GB	10.48576 GB		12	-	-	
vorel	/storage/vestec1-elixir/home/vorel	80 kB	2147.483648 GB	2202.0096 GB	none	33	2000000	2100000	none

■ Prikazy s3cmd/sbcmd pro manipulaci daty na S3 ulozisti

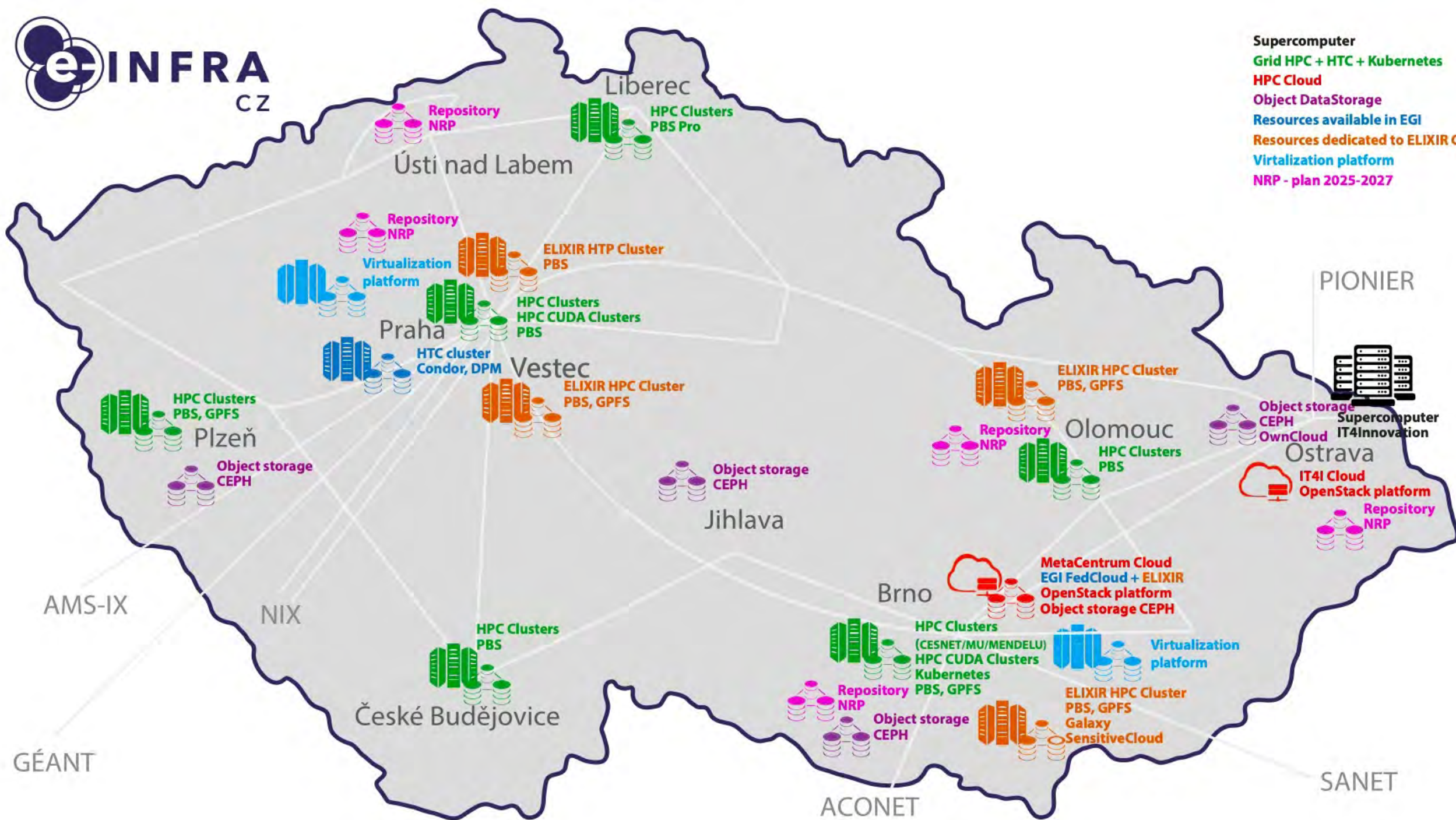
user	dir	space				files			
		used	soft quota	hard quota	grace	used	soft limit	hard limit	grace
	/storage/brno12-cerit/home/	759.667808 GB	-	-	none	12724824	-	-	none
	/storage/brno2/home/	6.650592 GB	4294.967296 GB	4294.967296 GB	none	563	2500000	2550000	none
	/storage/budejovice1/home/	8.572 MB	102.4 GB	153.6 GB		27	1000000	1100000	
	/storage/liberec3-tul/home/	350.644 MB	10.48576 GB	15.72864 GB		36	-	-	
	/storage/plzen1/home/	4.498536 GB	3221.225472 GB	3221.225472 GB	none	1497	3000000	3100000	none
	/storage/praha2-natur/home/	28 kB	7.340032 GB	10.48576 GB		20	-	-	
	/storage/praha5-elixir/home/	1.52 MB	1.048576 GB	1.153436 GB		79	10000	12000	
	/storage/pruhonice1-ibot/home/	4 kB	7.340032 GB	10.48576 GB		3	-	-	
	/storage/vestec1-elixir/home/	331.484888 GB	2147.483648 GB	2202.0096 GB	none	77710	2000000	2100000	none

Koncept více \$HOME adresářů a /storage/

Frontend address	Aliased as	Native home	OS	Physically located in	Note
charon.nti.tul.cz	charon.metacentrum.cz	/storage/librec3-tul	Debian 12	Liberec	
elmo.elixir-czech.cz	elmo.metacentrum.cz	/storage/praha5-elixir	Debian 12	Praha	Dedicated to Elixir users
nympha.meta.zcu.cz	nympha.metacentrum.cz, nympha.zcu.cz, minos.zcu.cz, minos.meta.zcu.cz, alfrid.meta.zcu.cz	/storage/plzen1	Debian 12	Plzen	
oven.metacentrum.cz		/storage/brno2	Debian 12	Brno	Reserved to access oven node only
perian.grid.cesnet.cz	perian.metacentrum.cz, onyx.metacentrum.cz	/storage/brno2	Debian 12	Brno	
skirit.ics.muni.cz	skirit.metacentrum.cz	/storage/brno2	Debian 12	Brno	
tarkil.grid.cesnet.cz	tarkil.metacentrum.cz	/storage/praha1	Debian 12	Praha	
tilia.ibot.cas.cz	tilia.metacentrum.cz	/storage/pruhonice1-ibot	Debian 12	Pruhonice	
zenith.cerit-sc.cz	zenith.metacentrum.cz	/storage/brno12-cerit	Debian 12	Brno	

Koncept více \$HOME adresářů a /storage/

Server	Directory	Backup Class	Note
storage-brno2.metacentrum.cz	/storage/brno2/	2	
storage-brno11-elixir.metacentrum.cz	/storage/brno11-elixir/	2	dedicated to ELIXIR-CZ
storage-brno12-cerit.metacentrum.cz	/storage/brno12-cerit/	2	
storage-plzen1.metacentrum.cz	/storage/plzen1/	2	
storage-plzen4-ntis.metacentrum.cz	/storage/plzen4-ntis/	3	dedicated to iti/kky groups
storage-praha2-natur.metacentrum.cz	/storage/praha2-natur/	0	
storage-praha6-fzu.metacentrum.cz	/storage/praha6-fzu/	0	
storage-praha5-elixir.metacentrum.cz	/storage/praha5-elixir/	3	
storage-budejovice1.metacentrum.cz	/storage/budejovice1/	3	
storage-liberec3-tul.metacentrum.cz	/storage/liberec3-tul/	0	
storage-pruhonice1-ibot.metacentrum.cz	/storage/pruhonice1-ibot/	3	
storage-vestec1-elixir.metacentrum.cz	/storage/vestec1-elixir/	2	also /storage/praha1/



- Vychází z podstaty gridové (distribuované) infrastruktury
- Zpravidla se skupinou klastrů v každé geografické lokalitě je také diskové pole
- **Výpočetní stroje mají také svůj nativní home (domovský adresář)**
- **Výpočetní úlohy mohou běžet na klastrech, kde je jiný home**
- Nelze spoléhat na to, že stejná data jsou na všech stojích
 - Protože jiné domovské adresáře...
 - Všechno je stále dostupné, jen třeba napsat cestu/přejít do jiného adresáře



```
[(BOOKWORM)vorel@skirit:~$ ls
CASTEP-25.12  META_SUPPORT  ondemand  OpenMolcas  pcangsd  Smilei  test_crys  test_CZ_shift  test_phyluce  test_uni
[(BOOKWORM)vorel@skirit:~$ pwd
/storage/brno2/home/vorel
[(BOOKWORM)vorel@skirit:~$ ssh adan1
Linux adan1.grid.cesnet.cz 6.1.0-38-amd64 #1 SMP PREEMPT_DYNAMIC Debian 6.1.147-1+zs2 (2025-08-22) x86_64

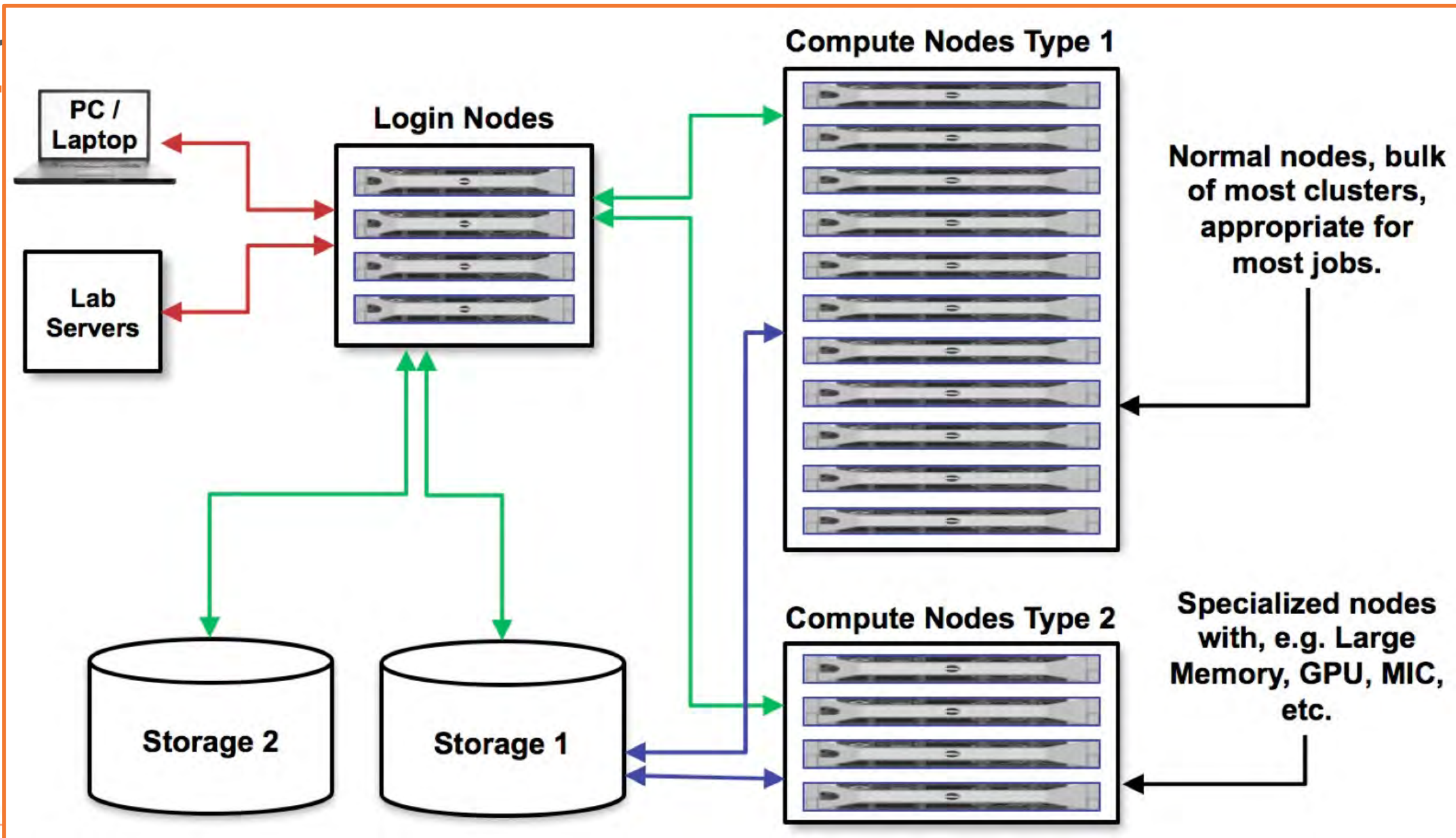
5 updates could not be installed automatically. For more details,
see /var/log/unattended-upgrades/unattended-upgrades.log

The programs included with the Debian GNU/Linux system are free software;
the exact distribution terms for each program are described in the
individual files in /usr/share/doc/*/copyright.

Debian GNU/Linux comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY, to the extent
permitted by applicable law.
Last login: Tue Aug 12 12:57:42 2025 from nympha.meta.zcu.cz
[(BOOKWORM)vorel@adan1:~$ pwd
/storage/praha1/home/vorel
[(BOOKWORM)vorel@adan1:~$ ls
geometry.in  inp.xyz  ondemand  xyz_to_aims.py
[(BOOKWORM)vorel@adan1:~$
```


- Vychází z podstaty gridové (distribuované) infrastruktury
- Zpravidla se skupinou klastrů v každé geografické lokalitě je také diskové pole
- **Výpočetní stroje mají také svůj nativní home (domovský adresář)**
- **Výpočetní úlohy mohou běžet na klastrech, kde je jiný home**
- Nelze spoléhat na to, že stejná data jsou na všech stojích
 - Protože jiné domovské adresáře...
 - Všechno je stále dostupné, jen třeba napsat cestu/přejít do jiného adresáře
- Rozložení zátěže, dostupnost úložišť jinou cestou např. při pádu frontendu





- Jiný typ úložiště, než klasická /storage/ pro domovské adresáře
- Úložiště, které je přímou součástí každého výpočetního stroje
- Určeno pouze pro data, která se používají v běžící úloze
 - Stará nesmazaná data ve scratchi se mohou kdykoliv smazat bez varování
- **Každá úloha automaticky definuje proměnnou \$SCRATCHDIR**
- Přímý přístup k datům pro CPU/GPU
- Každá úloha, které čte vstupní data více než jednou, by měla žádat o scratch
 - Snížení síťové provozu
 - Nezatěžuje se diskové pole (/storage/)
 - Úloha je rychlejší a robustnější (např. síťové výpadky)

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/infrastructure/scratch-storages>



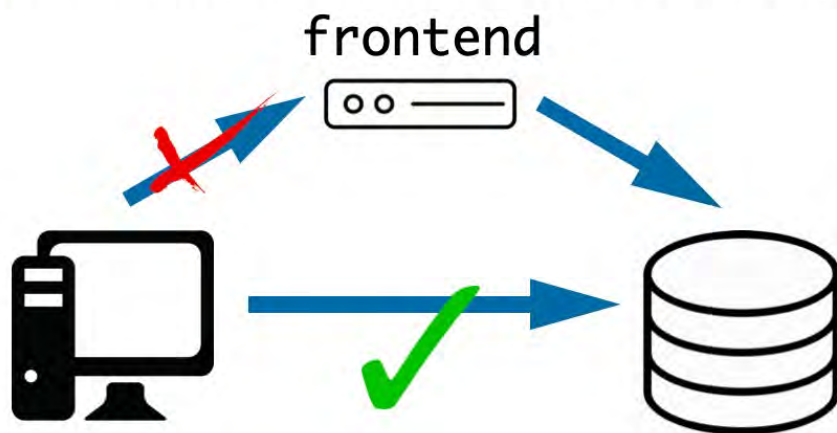
- Lze žádat o různé typy scratch adresářů
 - *scratch_local*
 - Univerzálně na všech strojích, nejčastěji SSD, ale i HDD
 - Cesta na stroji ve tvaru `/scratch/USERNAME/job_JOBID`
 - *scratch_ssd*
 - Explicitně požaduje SSD, není na všech strojích, kapacita jednotky TB
 - Cesta na stroji ve tvaru `/scratch.ssd/USERNAME/job_JOBID`
 - *scratch_shm*
 - Scratch v RAM paměti
 - Nejrychlejší
 - Rezervace RAM je součet objemu dat (vstup a výstup) a paměťové náročnosti výpočtu
 - Cesta na stroji ve tvaru `/dev/shm/scratch.shm/USERNAME/job_JOBID`
 - Boolean (ano/ne), rezervace přes `qsub` parametr `:mem`



- Lze žádat o různé typy scratch adresářů
 - *scratch_shared*
 - Scratch sdíleny v rámci celého klastu
 - Zatím pouze v rámci GPU klastrů Bee (BeeGFS) a Galdor
 - Bez politiky automatického promazávání
 - Vhodné pro úlohy, které zpracovávají jednu velkou datovou sadu/databázi
 - Jiná politika pojmenování adresáře v /scratch.shared/USERNAME/, nesmí začínat jako „job_“.
 - Inicializační úloha kopírující data, další pak již čistě výpočetní

```
qsub -l select=1:ncpus=1:mem=4gb:scratch_local=10gb -l walltime=1:00:00  
cp my_input_data.txt $SCRATCHDIR  
...  
cp $SCRATCHDIR/my_results.txt /storage/city/home/user_name/
```

- Do not use frontends, copy data directly on storage and use compressed files (.tar, .zip, .gz, etc.)
- SFTP client for Windows users (WinSCP, FileZilla, CyberDuck)



```
scp my_data.gz vorel@skirit.metacentrum.cz:\  
/storage/praha5-elixir/home/vorel
```

```
scp my_data.gz \  
vorel@storage-praha5-elixir.metacentrum.cz:~
```


- Do r
- (.tar,
- SFTP

ed files

Server	Directory	Backup Class	Note
storage-brno2.metacentrum.cz	/storage/brno2/	2	
storage-brno11-elixir.metacentrum.cz	/storage/brno11-elixir/	2	dedicated to ELIXIR-CZ
storage-brno12-cerit.metacentrum.cz	/storage/brno12-cerit/	2	
storage-plzen1.metacentrum.cz	/storage/plzen1/	2	
storage-plzen4-ntis.metacentrum.cz	/storage/plzen4-ntis/	3	dedicated to iti/kky groups
storage-praha2-natur.metacentrum.cz	/storage/praha2-natur/	0	
storage-praha6-fzu.metacentrum.cz	/storage/praha6-fzu/	0	
storage-praha5-elixir.metacentrum.cz	/storage/praha5-elixir/	3	
storage-budejovice1.metacentrum.cz	/storage/budejovice1/	3	
storage-liberec3-tul.metacentrum.cz	/storage/liberec3-tul/	0	
storage-pruhonice1-ibot.metacentrum.cz	/storage/pruhonice1-ibot/	3	
storage-vestec1-elixir.metacentrum.cz	/storage/vestec1-elixir/	2	also /storage/praha1/

cz:\

cz:~

/data/large-data

```
(BOOKWORM)vorel@elmo:~$ qsub -l -l scratch_ssd=1gb
qsub: waiting for job 13372263.pbs-m1.metacentrum.cz to start
qsub: job 13372263.pbs-m1.metacentrum.cz ready
(BOOKWORM)vorel@galdor19:~$ cd $SCRATCHDIR

(BOOKWORM)vorel@galdor19:/scratch.ssd/vorel/job_13372263.pbs-m1$ cp -r \
/storage/brno2/home/vorel/input_data_set .

(BOOKWORM)vorel@galdor19:/scratch.ssd/vorel/job_13372263.pbs-m1$ scp -r \
storage-brno2.metacentrum.cz:~/input_data_set .

(BOOKWORM)vorel@galdor19:/scratch.ssd/vorel/job_13372263.pbs-m1$ rsync -avh \
storage-brno2.metacentrum.cz:~/input_data_set/ .
```

Příklad skriptu dávkové úlohy

```
#!/bin/bash
#PBS -q default@pbs-m1.metacentrum.cz
#PBS -l walltime=24:0:0
#PBS -l select=1:ncpus=8:mem=100gb:scratch_ssd=50gb:mpiprocs=1:ompthreads=8
#PBS -N my_job_name
#PBS -M my_email@xyz
#PBS -m e

ulimit -s unlimited
trap "clean_scratch" TERM EXIT
export TMPDIR=$SCRATCHDIR

# test if a scratch directory exists
# variable SCRATCHDIR is set automatically
test -n "$SCRATCHDIR" || { echo >&2 "Variable SCRATCHDIR is not set!"; exit 1; }

# set a DATADIR variable
DATADIR="/storage/brno12-cerit/home/vorel/data/"

# copy input file "data.fa" to the scratch directory
cp $DATADIR/data.fa $SCRATCHDIR || { echo >&2 "Error while copying input file(s)!!"; exit 2 }

# move into the scratch directory
cd $SCRATCHDIR

# load a module for your application
module add blast-plus/blast-plus-2.12.0-gcc-8.3.0-ohlvt4

# run the calculation
# do not forget to use reserved CPUs by '-num_threads' flag
# variable PBS_NCPUS is a number of CPUs requested for the entire job
blastp -query data.fa <other_parameters> -num_threads $PBS_NCPUS -out results.txt

#copy results
cp results.txt $DATADIR || export CLEAN_SCRATCH=false
```

- Define HW resources (**-l**), queue (**-q**), and walltime (**-l**), set the job name (**-N**) and email alert (**-m**)
- You can define as many variables as you want
- Available modules can be listed by command **module ava *key_word*** on any frontend
- The scratch directory will be cleaned automatically

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/run-basic-job#batch-job>



- The opposite of batch jobs (waiting for the user's input...)
- Best choice for test calculations (which should not be run directly on frontends)
- An interactive job is requested by the qsub command with the `-I` (uppercase "i") option

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/run-basic-job#interactive-job>

```
(BUSTER)vorel@skirit:~$ qsub -I -l select=1:ncpus=4:mem=50gb:scratch_local=30gb -l walltime=1:00:00
qsub: waiting for job 11405230.meta-pbs.metacentrum.cz to start
qsub: job 11405230.meta-pbs.metacentrum.cz ready

vorel@zenon31:~$ cd $SCRATCHDIR
vorel@zenon31:/scratch.ssd/vorel/job_11405230.meta-pbs.metacentrum.cz$ module add orca/orca-5.0.1-intel-19.0.4-bnofsgq
vorel@zenon31:/scratch.ssd/vorel/job_11405230.meta-pbs.metacentrum.cz$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) metabase                      2) openmpi/openmpi-4.0.4-intel-19.0.4-gpu-xri6uan  3) orca/orca-5.0.1-intel-19.0.4-bnofsgq
vorel@zenon31:/scratch.ssd/vorel/job_11405230.meta-pbs.metacentrum.cz$
vorel@zenon31:/scratch.ssd/vorel/job_11405230.meta-pbs.metacentrum.cz$ ...time for coffee...
-bash: ...time: command not found
vorel@zenon31:/scratch.ssd/vorel/job_11405230.meta-pbs.metacentrum.cz$ orca < input > output
```



- **GPU acceleration for significant speedup of calculations**
- ~140 nodes, ~500 GPU cards (GTX 1080Ti - H100 100GB)
- Requires application with GPU support
- Maximum eight GPU cards on a single node, typically two or four
- Special DGX cluster with eight Nvidia H100 80GB GPU cards
 - Grant competition
- Specific parameters
 - **gpu_mem** (minimum amount of memory on the card)
 - **gpu_cap** (a minimal version of GPU architecture)
 - **cuda_version** (version of CUDA installed on the node)


```
#!/bin/bash
#PBS -N run2_dorado_mod
#PBS -l select=1:ncpus=4:ngpus=1:mem=30gb:scratch_ssd=250gb:gpu_mem=20gb:gpu_cap=compute_80
#PBS -l walltime=8:0:0

cd $SCRATCHDIR

scp storage-brno12-cerit.metacentrum.cz:~/Metylace_hemonch/RUN_2_ISE/02_run2_ISE_reads.pod5 $SCRATCHDIR
scp -r storage-brno12-cerit.metacentrum.cz:~/Metylace_hemonch/SOFT/dorado_0.9.1/models/dna_r9.4.1_e8_sup@v3.3* $SCRATCHDIR
cp /storage/brno12-cerit/home/vorel/Metylace_hemonch/Haemonch_refer/haemonchus_contortus.PRJEB506.WBPS19.genomic.fa $SCRATCHDIR

export PATH=/storage/brno12-cerit/home/vorel/Metylace_hemonch/SOFT/dorado_0.9.1/bin/:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/storage/brno12-cerit/home/vorel/Metylace_hemonch/SOFT/dorado_0.9.1/lib/:$LD_LIBRARY_PATH
module add minimap2/2.22

dorado basecaller dna_r9.4.1_e8_sup@v3.3 ./02_run2_ISE_reads.pod5 -v -x cuda:all --min-qscore 5 --trim all \
--reference haemonchus_contortus.PRJEB506.WBPS19.genomic.fa --modified-bases 5mCG_5hmCG > 03_dorado_run2_ISE.bam

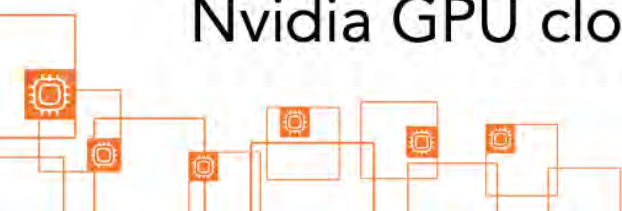
dorado summary 03_dorado_run2_ISE.bam > 03_dorado_run2_ISE.stat

scp 03_dorado_run2_ISE.* storage-brno12-cerit.metacentrum.cz:~/Metylace_hemonch/RUN_2_ISE/

clean_scratch
```

- cuda_version (version of CUDA installed on the node)

- Singularity (Apptainer) is an alternative to Docker
- Container system for HPC (non-root access)
- A container is a standard unit of software that packages up code and all its dependencies so the application runs quickly and reliably from one computing environment to another
- Saves time, prevents conflicts between applications
- Every Docker container can be converted to a Singularity image and used in MetaCentrum
- As pre-prepared Singularity images, users can use (e.g.) OpenFOAM, TE-TOOLS (RepeatMasker, RepeatModeler), Peregrine (assembler for long reads), Nvidia GPU cloud (PyTorch, Tensorflow)



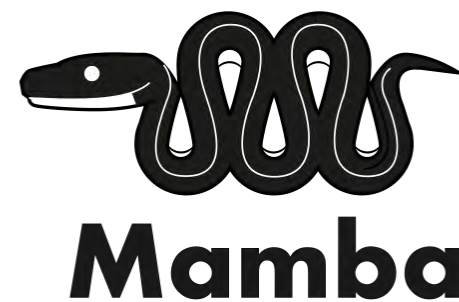
■ There are so many different ways...

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/software/install-software>

- Binary distributions (precompiled form, download them and use them)
- R, Python, Perl, Julia, Debian, etc. libraries (from repositories)
- Package managers like Mamba (fully automated, easy to use)
- Docker (Kubernetes, cloud) and Singularity/Apptainer images (grid, conversion Docker -> Singularity)
- Snapshots of entire VMs (cloud, OnDemand)
- Local compilation (GCC, Intel compilers, BLAS/LAPACP math libraries, CUDA support and so on...)



- Snažíme se učit uživatele instalovat SW správcem Mamba
 - Vylepšená verze správce Conda
 - Stejná syntaxe
 - Většina instalací funguje na první pokus



```
module add mambaforge
# create new environment called segemehl-0.3.4 (with python 3.8)
mamba create --prefix /storage/city/home/user_name/segemehl-0.3.4 python=3.8 -y
# activate the environment
mamba activate /storage/city/home/user_name/segemehl-0.3.4
# install the package
mamba install -c bioconda segemehl -y
# leave the environment
mamba deactivate
```

```
(BOOKWORM)vorel@elmo:~$ mamba create --prefix /storage/city/home/user_name/segemehl-0.3.4 -c bioconda segemehl -y
```



- go_to_scratch utility

- Realtime monitoring of running jobs; redirection to computational node

`go_to_scratch job_ID@PBS_server_full_name`

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/software/utilities#go-to-scratch>

- qextend utility

- Walltime, which could be reserved by PBS, is limited to 720 hours
- Users are allowed to prolong their jobs in a limited number of cases

`qextend job_ID@PBS_server_full_name additional_walltime_hh:mm:ss`

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/jobs/extend-walltime>

- pbs-get-job-history utility

- Complex information about current or historical jobs

`pbs-get-job-history job_ID@PBS_server_full_name`

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/jobs/finished-jobs#older>



- HW resources (CPUs, GPUs, RAM, scratch, walltime,...) are reserved by PBS
- Detailed documentation: <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/resources/resources>
- It requires some experience (keep some reserve)
- Helper tool for qsub command assembly

Personal view

This page shows a personal view of the PBS system for the user **vorel**.

Jobs of user "vorel"

user	job count					CPU count				
	total	queued	running	completed	other	total	queued	running	completed	other
vorel	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Links

- list of my jobs
- personal view of storages
- **qsub assembler**

Click on it...

Go to metavo.metacentrum.cz -
Current state - Personal view - **Qsub assembler**

(Stav zdrojů - Osobní pohled
Sestavovač qsub)

https://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/qsub_pbspro

qsub -l walltime=1 : 0 : 0 -q default@meta-pbs.metacentrum.cz \

-l select=1 : ncpus=1 : ngpus=0 : mem=400 mb : scratch_local=400 ✓ mb

cluster ...

city ...

SPECfp2017 per core ...

other resources ...

:arch=

:biocev=

:centos=

:cgroups=

:cluster=

:cpu_flag=

:cpu_vendor=

:cuda_version=

:gpu_cap=

:host=

:hyperthreading=

:infiniband=

:luna=

:os=

:osfamily=

:pbs_server=

:pruhonice=

:scratch_shm=

:uv=

:vestec=

:vnode=

Find machines matning the resource specification

CPU performance

:spec=7.4

:spec=8.0

:spec=9.1

:spec=10.4

Click on it...

■ And you will see...

selection from command line

```
qsub -l walltime=24:0:0 -q default@meta-pbs.metacentrum.cz -l select=1:ncpus=8:mem=100gb:scratch_ssd=50gb
```

selection in shell script

```
#!/bin/bash
#PBS -q default@meta-pbs.metacentrum.cz
#PBS -l walltime=24:0:0
#PBS -l select=1:ncpus=8:mem=100gb:scratch_ssd=50gb
#PBS -N my_awesome_job
```

Result

OK

The requirement is 1 machine, and 93 such machines are free, out of 289 machines matching the requirements. The job is submitted.

Machines available right now

adan1 (32 CPU, 187.6 GiB RAM, 697.6 GiB HDD)	adan2 (32 CPU, 187.6 GiB RAM, 783.6 GiB HDD)	adan3 (16 CPU, 171.6 GiB RAM, 766.6 GiB HDD)	adan5 (32 CPU, 187.6 GiB RAM, 744.6 GiB HDD)	adan6 (32 CPU, 187.6 GiB RAM, 705.4 GiB HDD)
--	--	--	--	--

- Computing nodes and frontends have limited quotas (~1 GB) for writing out of the scratch and home directory
- Exceeding this quota will cause the termination of the process
- The most common problems are caused by:
 - Write to /tmp
 - Very large stdout and stderr streams

```
export TMPDIR=$SCRATCHDIR
```

```
my_app < input ... 1>$SCRATCHDIR/stdout 2>$SCRATCHDIR/stderr
```

- Utility **check-local-quota** can be executed on each node



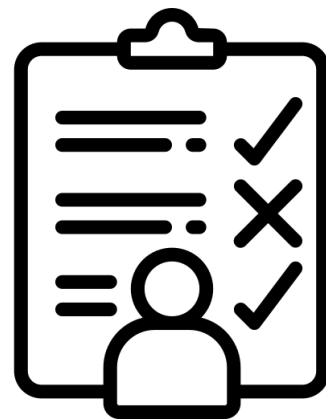
- From the point of view of performance (necessary PBS hardware requirements to run every single job), an ideal job is running for at least 30 minutes
- Startup overhead may be a significant part of the whole processing time
- Aggregate short jobs into bigger groups with longer walltime

`-l walltime=00:30:00` (and more)



Zhodnocení uživatelského dotazníku

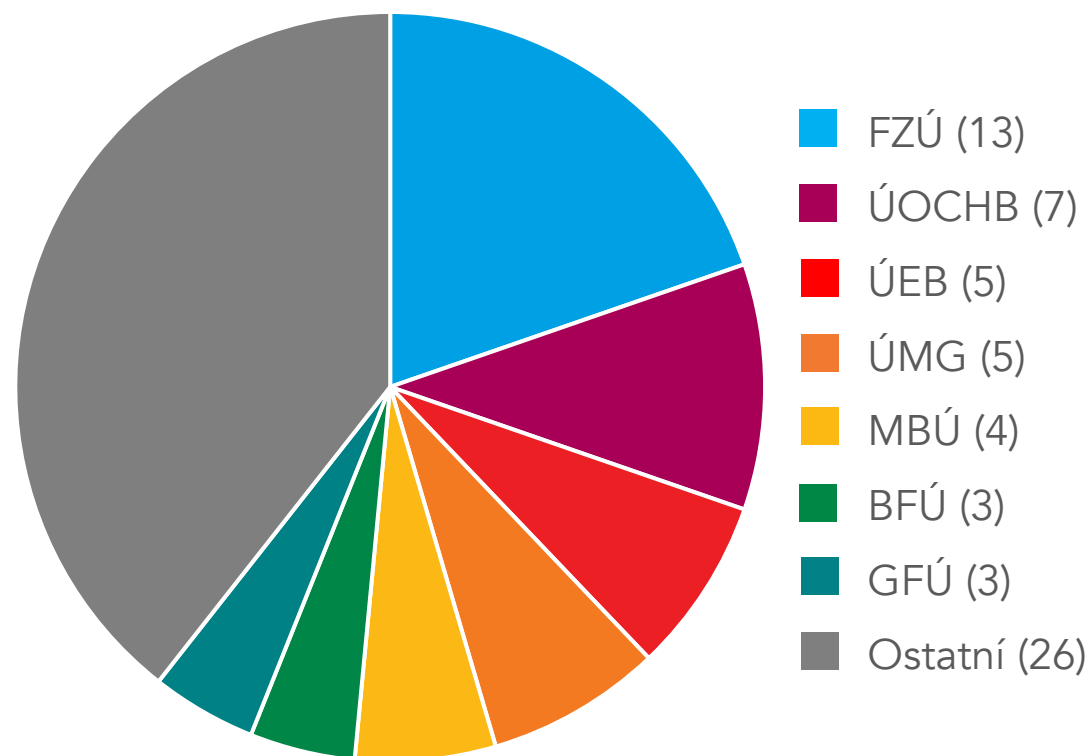
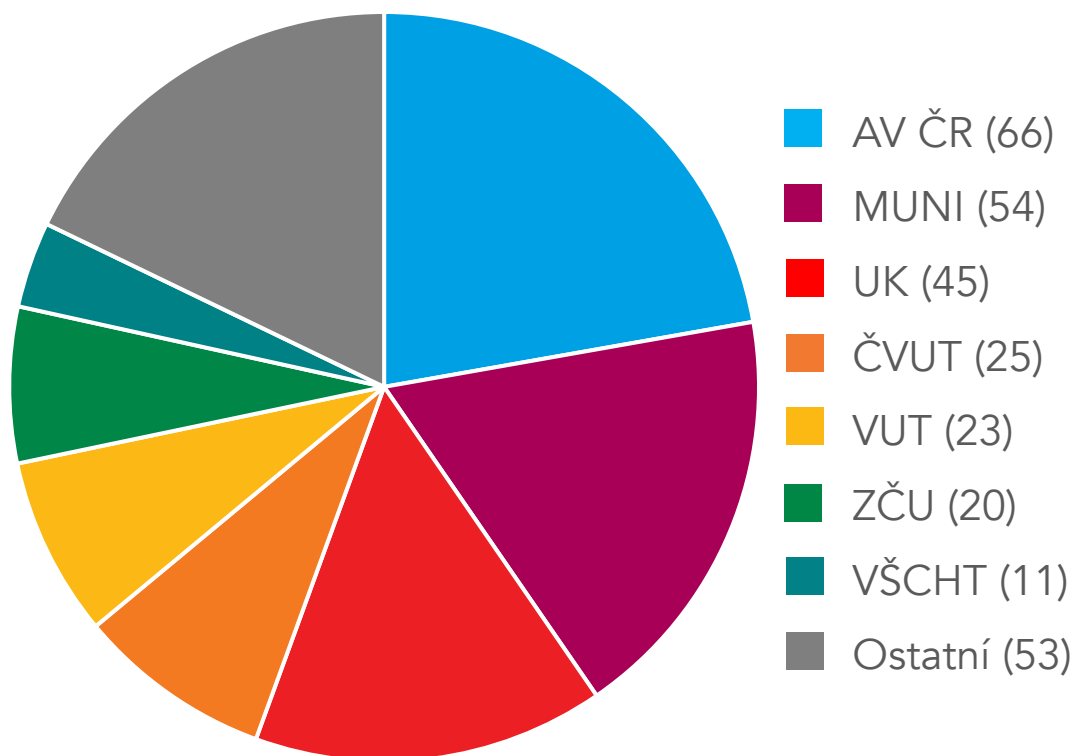
- **Poslední dotazník za rok 2024**, sběr během ledna a února 2025
- **Sbírán za celou e-infrastrukturu e-INFRA CZ**
 - MetaCentrum (gridové výpočty)
 - Cloudová služba (OpenStack)
 - Kubernetes (orchestrátor Docker obrazů)
 - Sensitive cloud (OpenStack)
 - IT4I (superpočítačové centrum)
- **Metodiky UMUX-Lite a SUS** (pro MetaCentrum a IT4I)
- **443 odpovědí** (návratnost 6,8 %), **292 kompletních vyplnění** (66 %)
- **Analyzováno celkem 297 odpovědí** (dalších 5 se 75% vyplněním)

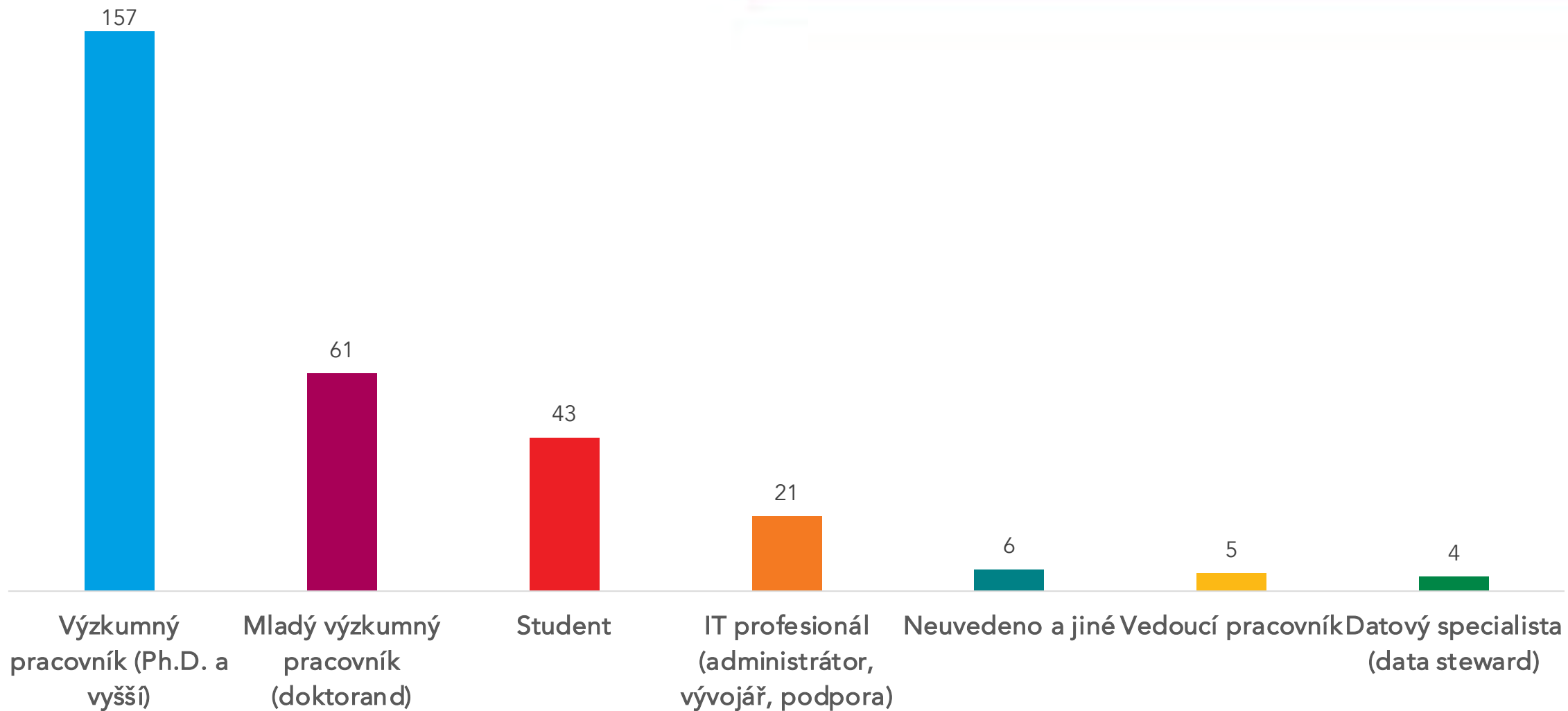


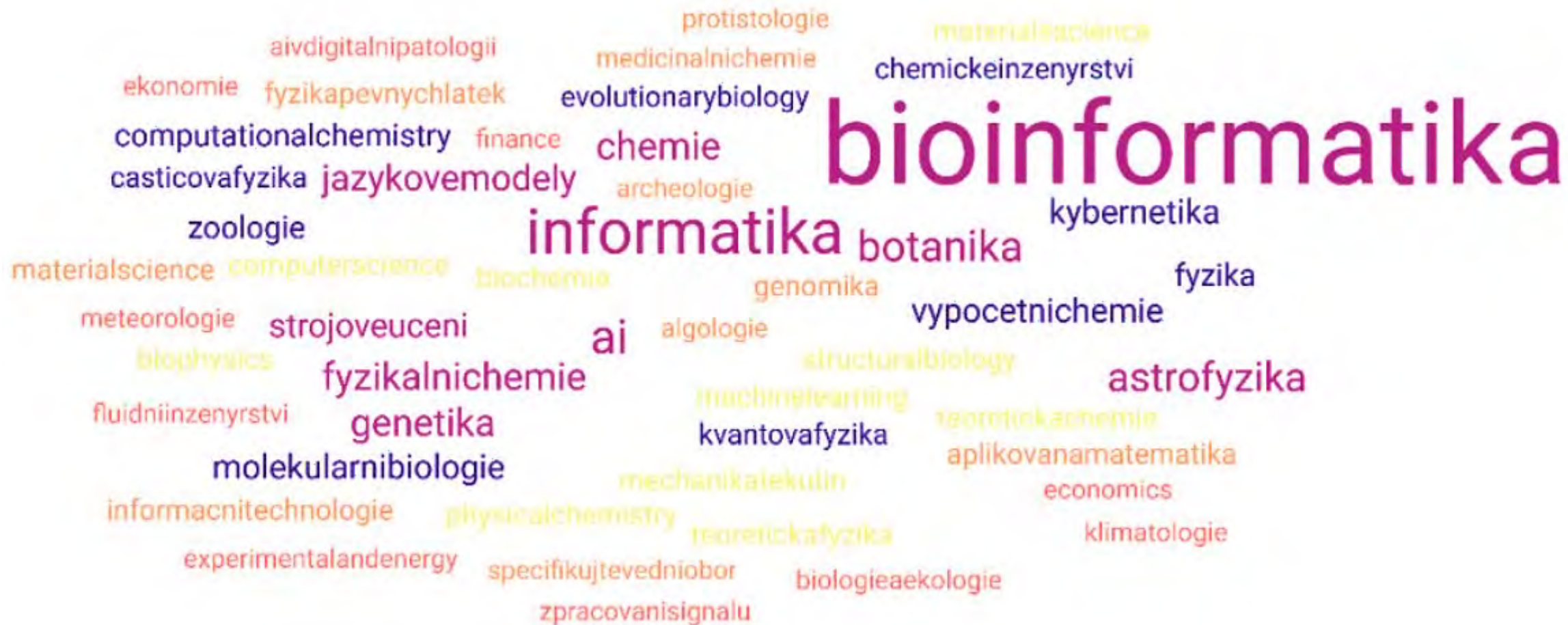
Děkujeme všem, kteří se dotazníku zúčastnili, a zejména těm, kteří nelitovali času a rozvedli své odpovědi formou volného vyjádření. Je to pro nás cenná informace o tom, ve kterých oblastech jsou služby MetaCentra bezproblémové a kde bychom naopak měli něco vylepšit.



- Afiliace podle číselníku MŠMT, 50 různých institucí







■ Rozsah a aktuálnost dokumentace

„Ohledne dokumentace: přijde mi to chaotické...”

„Ohledně dokumentace: popravdě, původní forma dokumentace ve formě wiki pro mě byla přehlednější a pokud jsem něčemu nerozuměl, našel jsem to tam spíše než v nové dokumentaci...”

„dokumentace: pro běžného biologa by měla být ještě o hodně víc polopatická”

- Víme o tom, dokumentace stále prochází procesem vývoje
- Vzhledová kompatibilita v rámci e-INFRA CZ (odklon od formátu Wikipedie)
- Rovnováha mezi tím, aby tam bylo všechno, nezastarávalo to a vyžadovalo minimum pravidelných zásahů
- Nechceme přepisovat obecné Linuxové návody



■ Rozsah dokumentace pro jednotlivé SW

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/software>

„Obecně dokumentace ohledně singularit je celkem nedostačující a její použití bylo tím celkem komplikované - např. různé možnosti příznaků (flagů), o kterých jsem neměl tušení...”

„i když obecně jsem velice spokojen, především v oblasti dokumentace kompilátoru apod-různé verze openmpi, .. by stalo za to dokumentaci mírně vylepsit.”

„Uvítal bych lepší dokumentaci modulů...”

- Návod pro komplexnější/netriviální SW je nutné výrazně vylepšit
- Snaha dokumentovat pouze to, co není standardní, jinak informace zastará
- Nechceme přepisovat manuálové stránky vývojářů daného SW



<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/basic-tutorial>

- Více praktických příkladů

„pro studenty mi chybí nějaký video tutoriál, který by je se všemi základními funkcemi srozumitelně seznámil...”

„Chybí jednoduchý start/příklad jak se přihlásit, přenést soubory například přes FileZilla nebo ondemand, jednoduše upustit skript buď na ondemand nebo přes příkazovou řádku, atd.”

„Obecně by bylo fajn mít nějaký beginner-friendly tutorial pro úplné začátečníky s prací s distribuovanými uzly.”

- Video tutoriály nakonec nebudou
- Další prostor pro významné rozšíření dokumentace
- V přípravě kapitola “A comprehensive manual for beginners”



- Možnost instalace vlastního SW

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/software/install-software>

„V dokumentaci jsem nebyl osobně schopen najít, jak si vytvořit vlastní virtuální prostředí.“

- Neaktuální a chybějící SW

„Uvítal bych více SW z oblasti kvantové chemie, např. ADF.“

- Rozšířit část „*How to install software*“ o další možnosti instalace SW
- Dotazník není ideální místo pro žádost o instalaci – pište na meta@cesnet.cz
- Asi nejsme schopni periodicky upgradovat všechny dostupné SW
- Aktivněji upgradovat zásadní a vývojový SW



- Dostupnost a přehled GPU strojů

<https://docs.metacentrum.cz/en/docs/computing/gpu-comput/gpu-job>

„Možno spraviť prehľadnú samotnú stránku na <https://metavo.metacentrum.cz/> pre GPU“

„nodes a parametre GPU ktoré su na nych, nech si človek vie prezrieť v jednej tabulke“

„Výber grafickej karty by mohol byť prívetivejší. Ocenil by som viac examples k tomu, jako si napísať skript pre qsub“

- Obecný problém s odkazem na vylepšení návodů/ukázek
- Přehledová tabulku o GPU strojích je k nalezení v dokumentaci
- Informace o stavu GPU klastrů na <https://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/nodes/physical>



■ Dostupnost a přehled

„Možno spraviť prístup“

<https://metavo.metacentrum.cz>

„nodes a parametre“

v jednej tabulke“

„Výber grafickej konzoly“

examples k tomu, ako

■ Obecný problém

■ Přehledová tabulka

■ Informace o stavu

Cluster	Nodes	GPUs per node	Compute capability	Mem [GB]	CuDNN
adan.grid.cesnet.cz	adan[1-61].grid.cesnet.cz	2x Tesla T4	7.5	16	YES
alfrid.meta.czu.cz	afrid[1-4].meta.czu.cz	2x L40	8.9	46	YES
bee.cerit-sc.cz	bee[1-10].cerit-sc.cz	2x H100 NVL	9.0	96	YES
capu.cerit-sc.cz	capu.cerit-sc.cz	8x H100	9.0	82	YES
cha.natur.cuni.cz	cha.natur.cuni.cz	8x GeForce RTX 2080 Ti	7.5	12	YES
elbi1.hw.elixir-czech.cz	elbi1[1].hw.elixir-czech.cz	2x NVIDIA A100	8.0	40	YES
fau.natur.cuni.cz	fau[1-3].natur.cuni.cz	8x Quadro RTX 5000	7.5	16	YES
fer.natur.cuni.cz	fer[1-3].natur.cuni.cz	8x RTX A4000	8.6	16	YES
fobos.metacentrum.cz	fobos[1-20].metacentrum.cz	4x L40s	8.9	46	YES
galdor.metacentrum.cz	galdor[1-20].metacentrum.cz	4x A40	8.6	46	YES
glados.cerit-sc.cz	glados[1-2].cerit-sc.cz	2x GeForce RTX 2080	7.5	8	YES
grimbold.metacentrum.cz	grimbold.metacentrum.cz	2x Tesla P100	6.0	12	YES
konos.fav.zcu.cz	konos[1-8].fav.zcu.cz	4x GeForce GTX 1080 Ti	6.1	12	YES
luna2022.fzu.cz	luna[201-206].fzu.cz	1x A40	8.6	46	YES
zia.cerit-sc.cz	zia[1-5].cerit-sc.cz	4x A100	8.0	40	YES

gpu-job

iet



- Relativně nízká návratnost
 - Podpořit motivaci představením konkrétních vylepšení dle minulého sběru
 - Odměna? Navýšení fairshare skóre? Zde je problém anonymity
 - Spoléháme na komunitní přístup
- O nedostacích víme, je nutné dokumentaci systematicky vylepšovat
 - Zlepšit orientaci v prostředí pro nové uživatele
 - Lépe zdokumentovat použití netriviálního SW
 - S ohledem na trvalou hodnotu informace
 - Plánované vytvoření souboru spustitelných ukázkových úloh
- Systematičtější komunikace s uživateli o novinkách a plánech



- Proaktivní upgrade zásadních SW
- Nastavení aktivnějšího přístupu k uživatelům
 - Výrazně vylepšit návody
 - Nové podrobné návody pro nové uživatele
 - Pravidelně nepravidelná online setkání na předem definované téma
 - Projekt **ambasadorů MetaCentra**
 - Námi proškolený uživatel působící na fakultě/ústavu/pracovní skupině
 - Ideálně aktivní uživatel se zkušeností práce v MetaCentru
 - Na bázi dobrovolnosti
 - Primární kontakt na daném pracovišti (náhrada za RT komunikaci s podporou)
 - Ví, kam předat složitější problémy
 - Kontakt meta@cesnet.cz



- Použít MetaCentrum a navazující služby není tak složité, jak by se mohlo zdát
- Dokumentace nebude nikdy perfektní a všespásná. Jinak bude tak dlouhá, že ji stejně nikdo nebude číst <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/support>
- Když něco nedává smysl, napište na podporu (meta@cesnet.cz)
- Piště nám náměty, co vám v dokumentaci chybí a co byste rádi viděli
- Piště okamžitě, pokud něco nefunguje
- Připomínejte se
- AI chaty také umí poradit <https://chat.ai.e-infra.cz/> <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/tutorials/chat-help>
- Dokumentace má vlastní AI (stále se vylepšuje)



- Použít M...
- mohlo z...
- Dokume...
- dlouhá,
- Když ně...
- Piště ná...
- Piště ok...
- Připomín...

MetaCentrum Docs

Welcome to the MetaCentrum grid computing service documentation.

- To access this service, please refer to the [How to get an account](#) section.
- To see an overview of the grid's infrastructure, go to the [Basic concepts](#) page.
- Basic guidelines for running jobs are described in [Userguide on running jobs](#).
- For information on the rules for working with data, see the [How to work with data](#) chapter.
- A list of the most commonly used software available in MetaCentrum can be found in the [Software](#) section.
- Contact [user support](#) with any enquiries.
- If you notice any errors in this documentation or if anything is missing, please open an issue or help us fix it in our [GitHub repository](#).

[Sign in to Ask GPT AI](#)

- AI chaty také umí poradit <https://chat.ai.e-infra.cz/>
- Dokumentace má vlastní AI (stále se vylepšuje) <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/tutorials/chat-help>

- Použít MetaCentrum mohlo zdát
- Dokumentace dlouhá, že ji stačí
- Když něco neproběhne
- Piště nám
- Piště okamžitě
- Připomínejte si
- AI chaty také už
- Dokumentace

Local Solver

Answers from AI may be inaccurate, please verify the information.

Ask a direct question or paste an error—only the first question searches the documentation; for a new topic, use the button below.

You

How to move data from brno12-cerit storage to brno2 storage?

Jarvis

To move data from brno12-cerit storage to brno2 storage, you can use the `scp` or `rsync` commands.

Using `scp`:

You can use the `scp` command to copy data directly between storages.

```
ssh storage-brno12-cerit.metacentrum.cz "scp -r ~/data storage-brno2.metacentrum.cz:~/"
```

or

```
ssh MetaUser123@storage-brno12-cerit.metacentrum.cz "scp ~/foo storage-brno2.metacentrum.cz:~/"
```

Using `rsync`:

Alternatively, you can use the `rsync` command.

```
ssh storage-brno12-cerit "rsync -avh ~/data storage-brno2:~/data_from_brno12-cerit/"
```

Source: [Data handling](#)

⌂ Retry

Ask Something Else

Ask GPT a question ...

message

by se

de tak

/docs/support

cz)

di viděli

Sign in to Ask GPT AI

s/chat-help

Děkuji za pozornost