



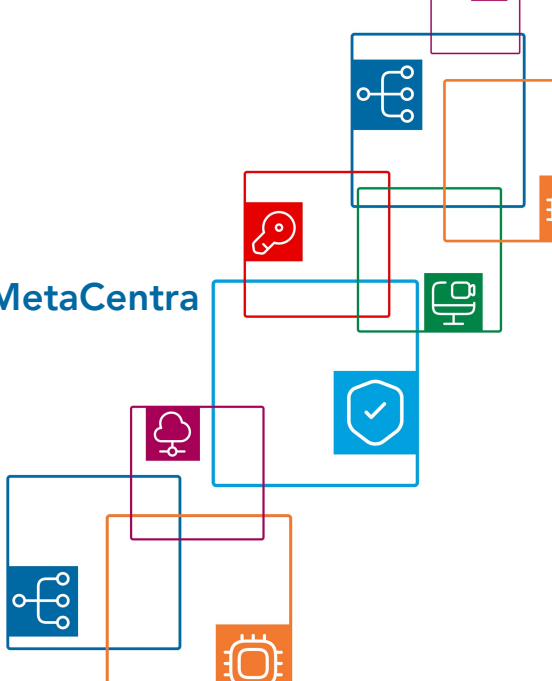
METACENTRUM

Úvod semináře a představení MetaCentra

Miroslav Ruda

CESNET

říjen 2025



- MetaCentrum - kdo jsme, naše služby, novinky
- Národní repozitářová platforma a EOSC - plány, aktuální stav
- Příklady využití z řad uživatelů
 - MetaCentrum z pohledu nově vzniklé výzkumné skupiny
 - Automatizovaná detekce hmyzu ve videích
 - MDDash: molekulární dynamika jako otevřená věda
- **Odpoledne podrobnosti o novinkách a vybraných službách**
 - Bezpečnost z pohledu uživatele
 - Jupyter Notebooky
 - Galaxy
 - AI modely - nabídka služeb, aktuální využití
 - Cloudové prostředí - OpenStack, Kubernetes
- **Praktické rady pro nováčky**
 - včetně možnosti řešení konkrétních problémů



Národní distribuované výpočetní prostředí, koordinace CESNET

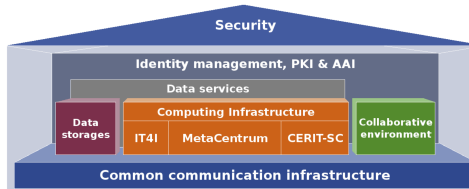
- zdroje CESNET i CERIT-SC (53.000 jader CPU)
- výpočetní zdroje umístěné na CESNETu, univerzitách, AV ČR
 - původní motivace sdílení zdrojů (HW) stále platí
 - poskytování dočasně volných zdrojů pro vzdálené uživatele
 - využití vzdálených zdrojů v případě naléhavého/velkého zatížení
 - použití jiných zdrojů během výpadku
 - zdroje pro spuštění projektu, kontrola vhodnosti HW
 - myšlenka funguje i pro cloud, drahé komerční licence
- komunitní přístup, centrální správa a AAI
- výpočetní grid, IaaS cloud a PaaS cloud
- integrace výpočetních clusterů dalších partnerů



- distribuovaný model užitečný pro různé případy použití
 - integrace zdrojů vlastněných jinými VI (ELIXIR)
 - zpracování velkých dat - není potřeba vzdáleného přenosu
 - architektura kompatibilní s datovými úložišti v EOSC CZ
- NGI v evropské e-infrastruktuře EGI, mandated org. v EOSC-A
- cílená podpora velkých projektů (VI, ESFRI)
- vývoj nových služeb/nástrojů podle potřeb uživatelů/projektů
 - OnDemand, Jupyter, Galaxy, Kubernetes
 - podpora zpracování citlivých dat
- služby volně dostupné pro akademické využití a spolupracující partnery ze zahraničí
 - "placení" publikacemi s poděkováním, určují prioritu uživatelů



- MetaCentrum je součást infrastruktury CESNETu od roku 1998
 - původně projekt MU, ZČU, UK, VUT
- oddělené VI CESNET a VI CERIT-SC od 2012
 - MetaCentrum stále integruje zdroje CERIT-SC
 - společný vývoj prostředí, včetně cloudových služeb
 - integrace zdrojů dalších organizací, včetně VI ELIXIR CZ
- od roku 2020 jediná společná e-infrastruktura e-INFRA CZ
 - CESNET, CERIT-SC (MU), IT4Innovations (VŠB)
 - sbližování prostředí MetaCentra a IT4Innovations



Spolupráce s projekty jako dlouhodobá motivace vývoje služeb

- HEP , astrofyzika - LHC, Auger, CTA, Belle
 - původní motivace gridu, nadále aktivní v EGI
- Life Science - ELIXIR (OpenScreen, CCT, Czech Bioimaging)
 - spolupracující VI, zdroje začleněné do MetaCentra
 - spolupráce při provozu služeb ELIXIRu
 - life-science je největší konzument zdrojů
- ESA – CollGS, Data Relay Hub
 - řada skupin a projektů využívajících Copernicus data

Mezinárodní e-infrastruktury

- EGI.eu - výpočetní infrastruktura koordinované přes Evropu
- EOSC (European Open Science Cloud) - sdílení vědeckých dat



Grid, centrálně spravované HTC a HPC clustery

- dávkové, dlouhé (dny/týdny) úlohy, paralelní výpočty
- včetně interaktivních úloh, GUI
 - Galaxy, Jupyter, OnDemand
- trvalé úložiště (GPFS+NFS) a lokální/sdílené úložiště scratch
- výpočty také v kontejnerech (Singularity)
 - HPC přístup, podpora pro non-root obrazy Dockerů
 - Software NVIDIA GPU Cloud (PyTorch, TensorFlow)
- distribuované clustery členů a partnerů e-INFRA CZ
 - vývoj a výzkum v oblasti plánování
 - počátky vývoje Perunu (AAI)
- podmnožina zdrojů dostupných také v infrastruktuře EGI



MetaCentrum cloud – virtuální stroj místo úloh

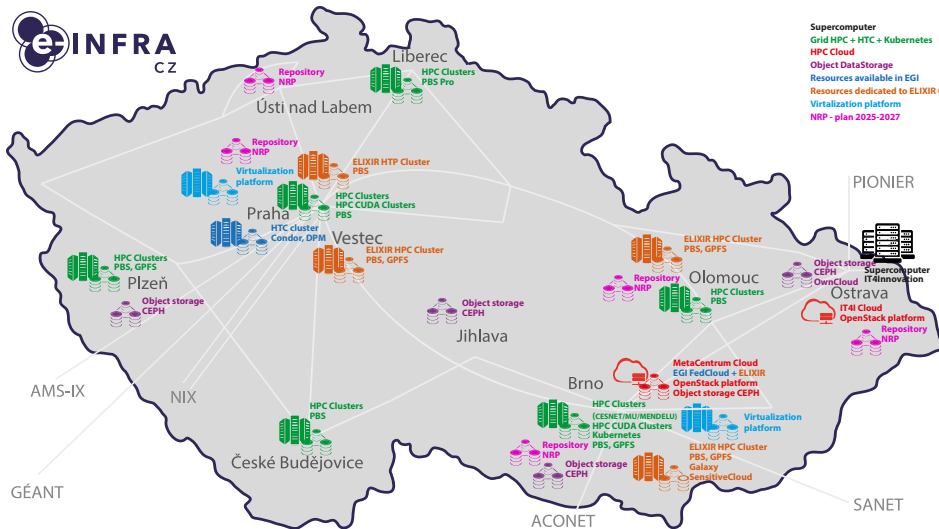
- obrazy poskytované MetaCentrem, EGI, projekty, uživatelé
- cloudové výpočty a služby spojené s výpočty (OpenStack)
 - ale také školení, výuka, bezpečnostní polygon KYPO
- Terraform nebo EGI IM pro virtuální clustery/K8s
- centrální instalace v Brně, společné úsilí CESNET a CERIT-SC
 - Bescar Cloud, od roku 2023 druhá instalace v IT4I
- přístupné i prostřednictvím EGI FedCloud, EOSC Marketplace
- v tomto prostředí provozujeme i služby EGI Jupyter a Binder
 - včetně EOSC EU uzlu a projektů ENVRI-Hub a EOSC Beyond
- možnost provozovat vlastní Kubernetes clustery



Containerový cloud, PaaS řešení

- **containery místo úloh/virtuálních strojů**
 - metoda balení softwarových balíčků, zapouzdření služeb
 - reprodukovatelnost, provenance
 - jak v HPC (Singularity) tak v cloudu (Docker, Kubernetes)
- **Kubernetes pro mikroslužby, správa virtuálních prostředí**
- **spravovaná služba, non-root kontejnery, GUI Rancher**
- **silná podpora interaktivních požadavků a požadavků workflows**
 - SaaS přístup pro Matlab, RStudio, NextFlow
- **Sensitive cloud – prostředí pro zpracování citlivých dat**
 - koordinuje CERIT-SC
 - v současné době Kubernetes
 - od roku 2024 s certifikací ISO 27.000





53.000 CPU jader, 20 PB, 500 GPU, 3.500 uživatelů, 310+ WoS

- HD uzly - 32-128 CPU jader (x86_64), 256-1024 GB RAM
- SMP servery - 2-3 TB RAM
 - specializované servery s 6/10 TB RAM
- NVIDIA GP-GPU - 160 uzlů, 500 karet
 - NVIDIA DGX2 s 8xH100 GPU, clustery s 28x H100, 88x L40s
 - NVIDIA A100, A10, A40, L40s, H100, BH200
- CPU jádra: grid - 35.800+6.500, IaaS 7.400, Kubernetes 3.000
- CPU roky: grid - 26.000+13.000, IaaS 10.000, Kubernetes 1.100
- clustery vlastněné rostoucím počtem partnerů
 - CESNET 22.000 a CERIT-SC 9.800
 - VI ELIXIR 5.800
 - FZU 5.400 a 5.200 pro LHC/EGI
 - ZČU, MU, UK, TUL, AV ČR



	2012	2016	2018	2019	2020	2021	2022	2023	2024
Počet uživatelů MC	613	1611	2020	2185	2225	2606	2710	3055	3490
Noví uživatelé (Meta)	312	742	713	762	774	792	767	850	1232
Počet úloh [miliony] Meta/EGI	1,1/ n/a	3,6/ 6	5/ 6,7	8,6/ 6,8	13,1/ 10	12,1/ 9,3	11,1/ 14,2	11,7/ 5,4	15/4,9
CPU čas [CPU let] Meta/EGI	2500/ n/a	9475/ 5963	11357/ 4074	13129/ 4531	16630/ 9160	22647/ 9581	27547/ 9218	31858 / 14770	37552/ 217886 HEPScore
Počet CPU jader vč. EGI	6028	17234	21344	26602	29874	34084	44088	47748	53004
Počet GPU				255	322	434	455	462	462



Výrazné posílení výpočetních clusterů z projektu OP JAK

- vedle posílení i podpora moderních trendů (GPU, AI, big data)
- v průběhu roku obnova 120 HD uzlů v ČB, Praze a Plzni
- obnova výpočetních clusterů VI ELIXIR
 - 30 HD serverů, 8 SMP serverů, 4 GPU servery

Obnova a rozšíření úložných kapacit

- obnova semi-permanentních home adresářů
 - Biocev a UOCHB (i ELIXIR)
 - Plzeň, České Budějovice, Brno (CESNET i CERIT-SC)
- sdílené scratch prostředí v Brně, do konce roku i v Plzni
 - BeeGFS, 0.5 PB v Brně, 2 PB v Plzni
- objektové úložiště pro cloud (celkově 1 PB Ceph)



Výrazné navýšení GPU kapacity pro výpočty i AI modely

- fobos: 22 serverů, každý 4x NVIDIA L40s (PBS)
- bee: 18 serverů, 10x2 H100 v PBS, 10x H100 v Kubernetes
- alfrid-II: 4 servery, každý 4x NVIDIA L40, vlastník ZČU
- capy: DGX server, 8xH100, v PBS, vyhrazený pro projekty
- kubernetes: 22 NVIDIA A40, 6 NVIDIA A10, 12 NVIDIA A100
- DGX B200 v Sensitive cloudu, 8xB200 GPU s 180GB/gpu, vlastník MU
- v plánu DGX B300, 8xB300, 2.4TB celkem, pro AI modely
- v plánu cluster s 28 RTX 6000 Pro GPU, napůl PBS a Kubernetes



- společné AAI pro celou e-INFRA CZ, perun.e-infra.cz
- docs.metacentrum.cz, docs.cerit-sc.cz, AI chat
- centrálně spravované softwarové balíky
 - více než 4000 balíčků, 700 změněno za poslední rok
 - centrální podpora conda/mamba balíčků
 - specializované containery (GPU, PyTorch, TensorFlow)
- podpora OnDemand pro PBS, ondemand.metacentrum.cz
 - RStudio, Jupyter, Ansys/Fluent, Matlab, TensorFlow, PyTorch
- Galaxy workflows, usegalaxy.cz
- Jupyter Notebooky v OOD, cloud.jupyter.e-infra.cz
- Rancher GUI pro Kubernetes, rancher.cloud.e-infra.cz
- Chat AI (LLM modely +API), chat.ai.e-infra.cz/
- pilotní přístup do NRP přes cmdline, Galaxy a Jupyter



- účet dostupný pro akademické využití (věda, výzkum, výuka)
- <https://metavo.metacentrum.cz/en/application/form>
 - roční prodlužování spojené se zadáním výsledků
- okamžitý přístup, priorita podle publikací s poděkováním
 - <https://docs.metacentrum.cz/en/docs/access/terms#acknowledgements-and-publications>
- podpora skupin a projektů = větší sdílený diskový prostor
 - včetně sdíleného scratch prostoru
 - možnost přístupu na DGX servery
- vlastníci clusterů s prioritním přístupem na "svoje zdroje"
- s prodlužováním spojujeme průzkum se spokojeností uživatelů
 - velké díky za 300 odpovědí v minulém roce!
 - vyhodnocení bude publikované v newsletteru e-INFRA CZ
 - snad vidíte pozitivní změny (dokumentace, školení, GUI, GPU)



Děkuji za pozornost

`support@metacentrum.cz`

`www.metacentrum.cz`

`docs.metacentrum.cz`

