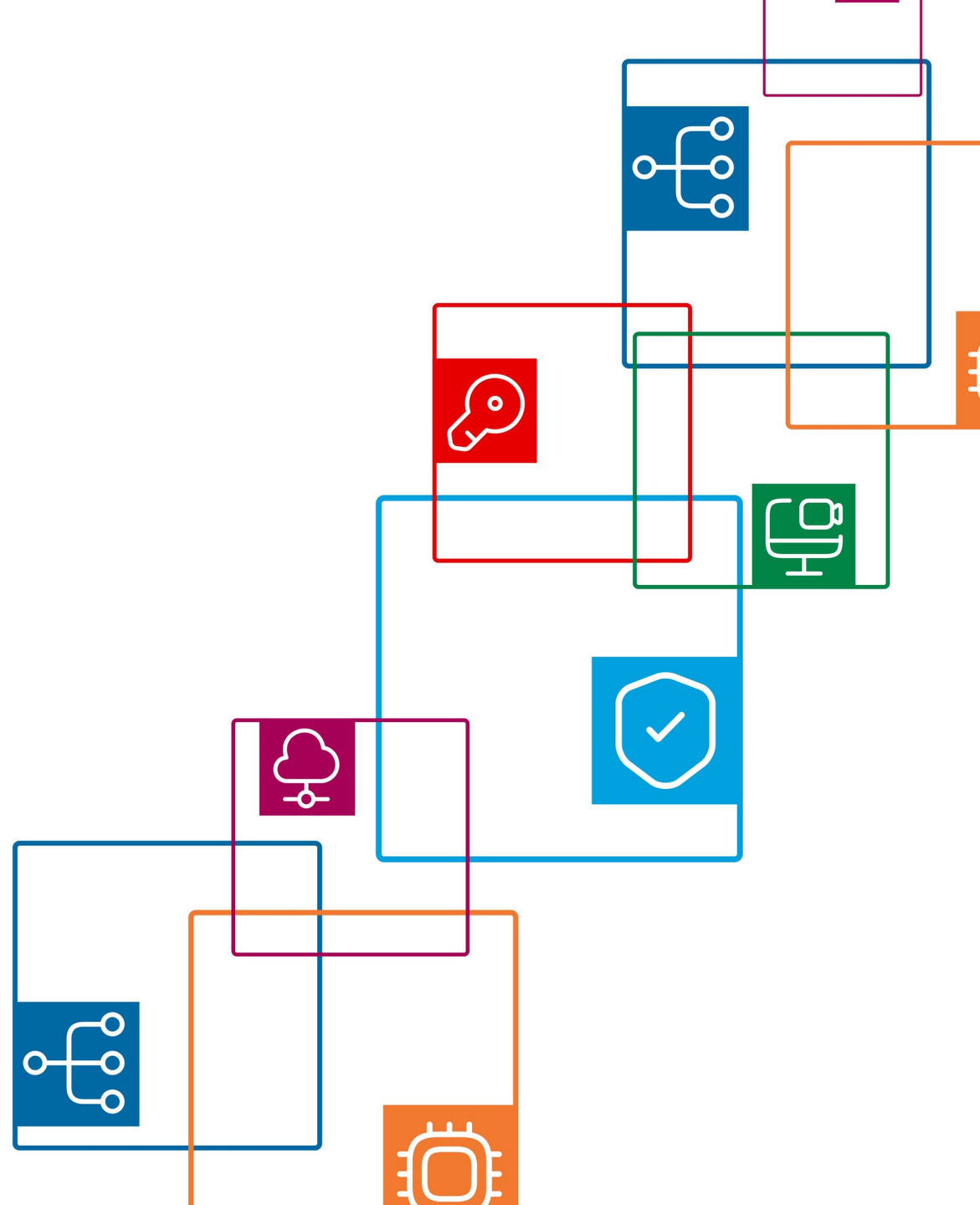


Jupyter notebooky ve službách MetaCentra

Anežka Melounová

Uživatelský seminář MetaCentra

Praha 2. 10. 2025



Jupyter notebooky

■ Jupyter notebooky

- komplexní nástroj pro sdílení a tvorbu dokumentů
- Python, R + další
- kombinace spustitelného kódu, textu, vizualizace...
- široké využití pro výuku, datovou analýzu, strojové učení atd.
- Jupyter notebook < Jupyter Lab < Jupyter Hub (multiuser)

A screenshot of a Jupyter notebook interface. The left sidebar shows a table of contents with sections like "Optical Coherence Tomography", "Imaging system - overview", "OCT Theory - overview", and "Fourier Domain OCT". The main area displays a document titled "1.3.3 Fourier Domain OCT (FDOCT)". The document text describes FDOCT and includes a mathematical equation for $I_D(k)$. The equation is:
$$I_D(k) = \frac{Q}{4} S(k) \left[R_R + \sum_{n=1}^N R_n \right] + \frac{Q}{2} S(k) \left[\sum_{n=1}^N \sqrt{R_R R_n} \cos[2k(z_R - z_n)] \right] + \frac{Q}{2} S(k) \left[\sum_{n,m=1}^N \sqrt{R_n R_m} \cos[2k(z_n - z_m)] \right]$$
 The document also includes a code cell with Python code for calculating the signal and a plot of the signal. The code is:

```
In [23]: lambda_0 = 1.5500
k_0 = 2.0*np.pi/lambda_0
Dlambda_0 = 0.100
Dk = 2.0*np.pi*Dlambda_0/lambda_0**2.0
k_range = np.linspace(-3.0*Dk+k_0, +3.0*Dk+k_0, 10000)
TD_OCT_signal = 0.25*0.5*(np.exp(-(k_range - k_0)/Dk)**2.0) \
+ 0.5*np.sqrt(0.5*2.0E-4)*(np.exp(-(k_range - k_0)/Dk)**2.0) \
*np.cos(2.0*k_range*(50.0)) \
+ 0.5*np.sqrt(0.5*1.5E-4)*(np.exp(-(k_range - k_0)/Dk)**2.0) \
*np.cos(2.0*k_range*(200.0))
```

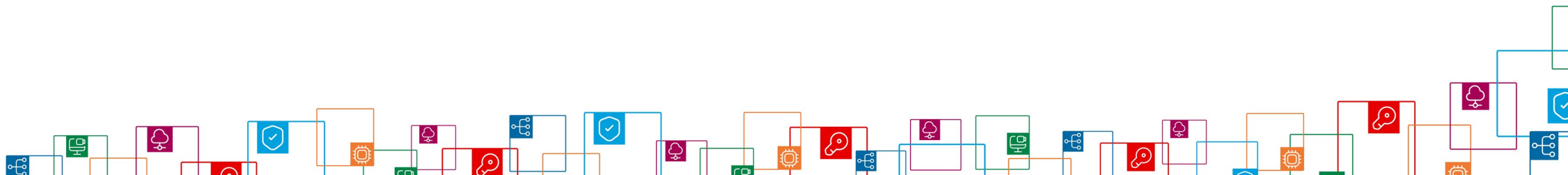
 The plot shows a red line representing the signal, with a peak around $k = 40$. The x-axis is labeled k (arb. unit) and ranges from 3.2 to 4.8. The y-axis is labeled $I_D(k)$ and ranges from 0.00 to 0.12.

Více platforem

Uživatelské rozhraní pro práci s výpočetními clustery;
vyvinuto v Ohio supercomputing Centre



**Jupyter notebooky
pro uživatele
Metacentra**



Více platforem

Jupyter notebooky pro uživatele Metacentra

Uživatelské rozhraní pro práci s výpočetními clustery;
vyvinuto v Ohio supercomputing Centre



cesnet

jupyter.metacentrum.cz

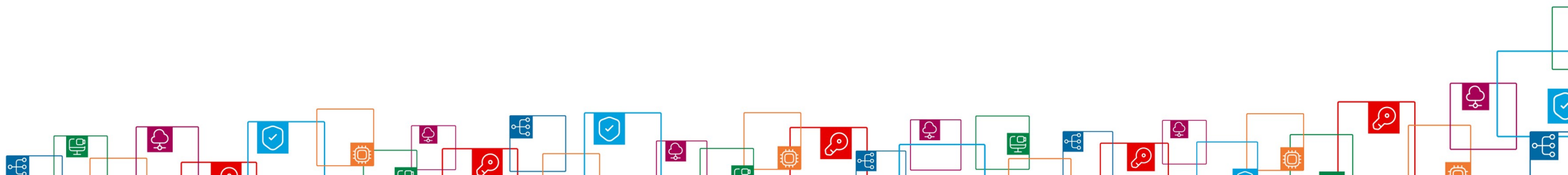
Opensourcový systém pro automatizaci deploymentu,
škálování a správu kontejnerových aplikací



kubernetes

MUNI
CERIT-SC

hub.cloud.e-infra.cz



Jupyter notebooky pro uživatele Metacentra

Uživatelské rozhraní pro práci s výpočetními clustery;
vyvinuto v Ohio supercomputing Centre



cesnet
.....

jupyter.metacentrum.cz

Opensourcový systém pro automatizaci deploymentu,
škálování a správu kontejnerových aplikací



kubernetes

MUNI
CERIT-SC

hub.cloud.e-infra.cz



openstack®

cesnet
.....

jupyter.metacentrum.cz



Jupyter notebooky pro uživatele Metacentra

Uživatelské rozhraní pro práci s výpočetními clustery;
vyvinuto v Ohio supercomputing Centre



cesnet
.....

jupyter.metacentrum.cz

Opensourcový systém pro automatizaci deploymentu,
škálování a správu kontejnerových aplikací



kubernetes

MUNI
CERIT-SC

hub.cloud.e-infra.cz



openstack®

cesnet
.....

~~jupyter.metacentrum.cz~~



Více platforem

Jupyter notebooky pro uživatele Metacentra

Uživatelské rozhraní pro práci s výpočetními clustery;
vyvinuto v Ohio supercomputing Centre



cesnet

jupyter.metacentrum.cz

Opensourcový systém pro automatizaci deploymentu,
škálování a správu kontejnerových aplikací



kubernetes

MUNI
CERIT-SC

hub.cloud.e-infra.cz



openstack

cesnet

jupyter.metacentrum.cz



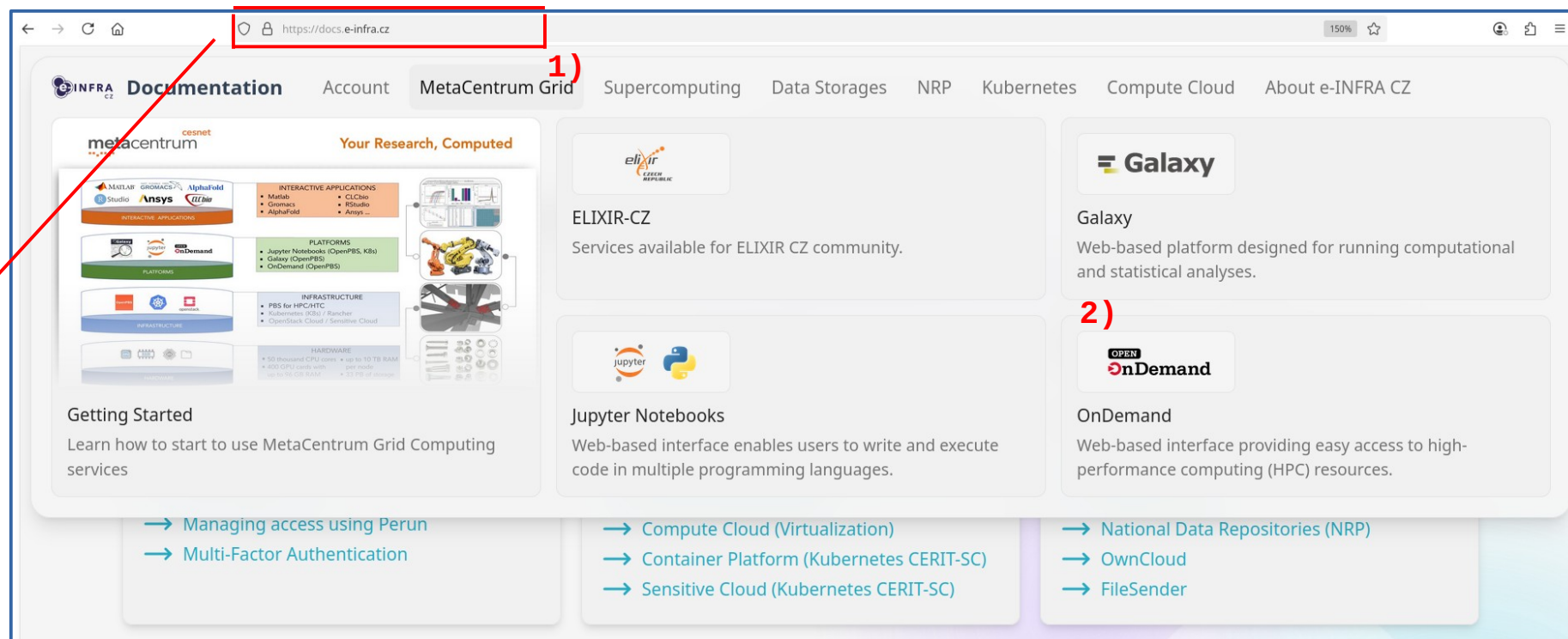
jupyter.e-infra.cz



OnDemand

- nízkoprahový přístup do infrastruktury MetaCentra, meta@cesnet.cz
- přes webový prohlížeč
- proklikat se k němu lze z dokumentace e-Infra ...

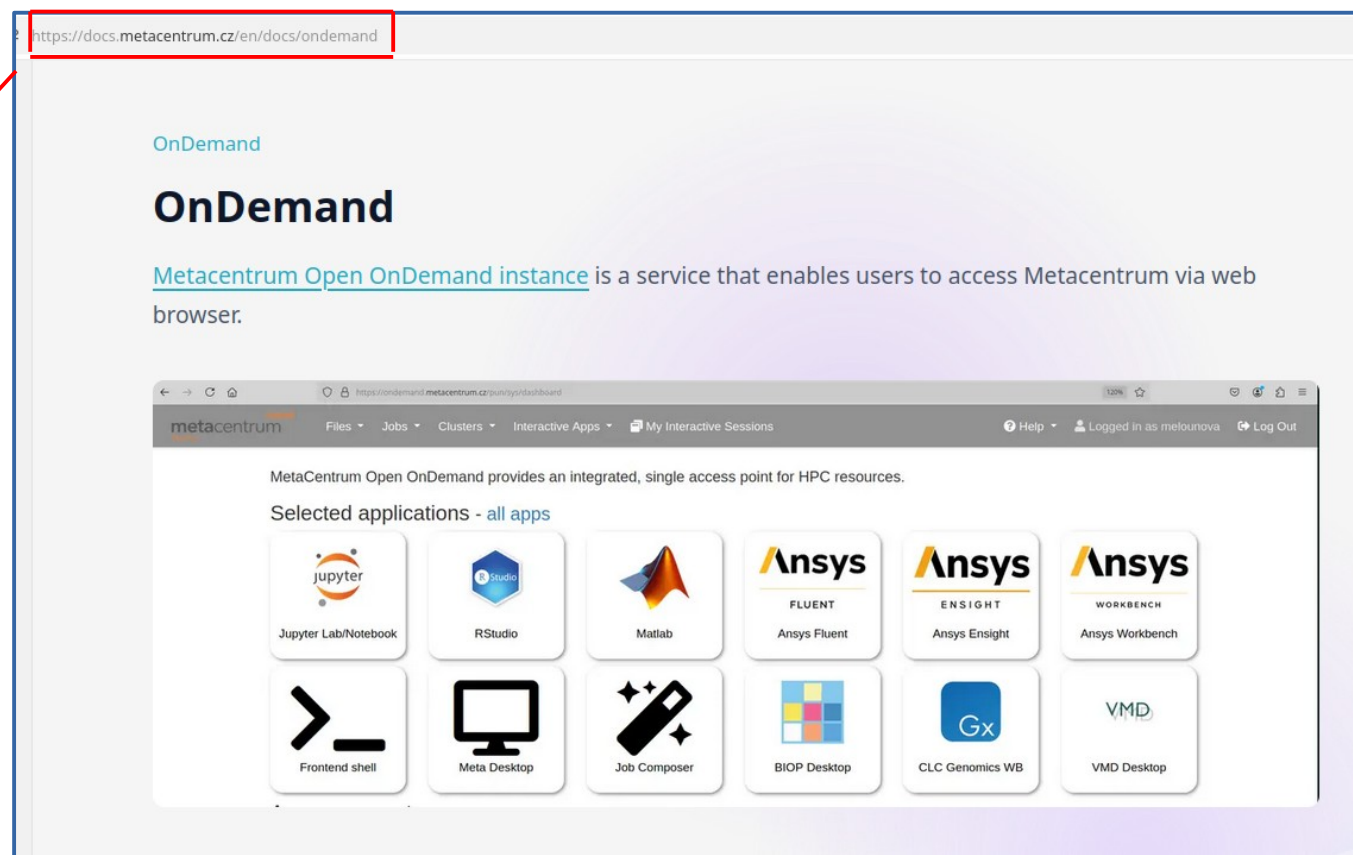
docs.e-infra.cz



OnDemand

- nízkoprahový přístup do infrastruktury MetaCentra, meta@cesnet.cz
- přes webový prohlížeč
- proklikat se k němu lze z dokumentace e-Infra ...
- ... a z dokumentace MetaCentra ...

docs.metacentrum.cz/en/docs/ondemand



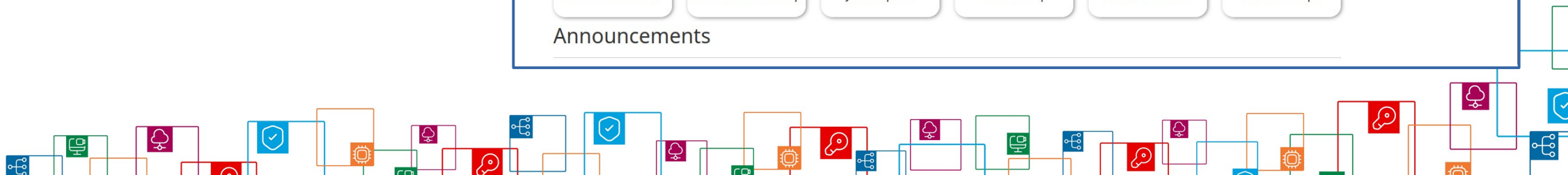
OnDemand

- nízkoprahový přístup do infrastruktury MetaCentra, meta@cesnet.cz
- přes webový prohlížeč
- proklikat se k němu lze z dokumentace e-Infra
- ... a z dokumentace MetaCentra ...
- ... anebo rovnou ondemand.metacentrum.cz

ondemand.metacentrum.cz

Login pomocí akademické identity,
NIKOLIV
uživatelským jménem a heslem do MetaCentra.

The screenshot displays the OnDemand web interface. At the top, the browser address bar shows `ondemand.metacentrum.cz/pun/sys/dashboard`, which is highlighted with a red box. A red arrow points from the URL `ondemand.metacentrum.cz` in the list above to this address bar. The interface includes a navigation bar with links for Files, Jobs, Clusters, Interactive Apps, and My Interactive Sessions. The main content area features a welcome message, a section for active interactive sessions (showing one session with a 'Delete' button), and a grid of application tiles including Jupyter Lab/Notebook, RStudio, Matlab, Ansys Fluent, Ansys Insight, Ansys Workbench, Perian Shell Access, MetaCentrum Desktop, Job Composer, BIOP Desktop, CLC Genomics WB, and VMD Desktop. An 'Announcements' section is at the bottom.



OnDemand

- nízkoprahový přístup do infrastruktury MetaCentra
- přes webový prohlížeč
- proklikat se k němu lze z dokumentace e-Infra
- ... a z dokumentace MetaCentra ...
- ... anebo rovnou ondemand.metacentrum.cz

ondemand.metacentrum.cz



Login pomocí akademické identity*,
NIKOLIV
uživatelským jménem a heslem do MetaCentra.

*uživatelské jméno a heslo na instituci
kde studujete/pracujete

ondemand.metacentrum.cz/pun/sys/dashboard

Files Jobs Clusters Interactive Apps My Interactive Sessions Help Logged in as melounova Log Out

MetaCentrum Open OnDemand provides an integrated, single access point for HPC resources.

Active interactive sessions [view all \(1\)](#)

OpenStack VM (95e555b2-1c94-4825-a45f-ae7315d17c7c)	Undetermined
Created at: 2025-09-22 10:42:05 CEST Session ID: b7800519-6fe0-49f8-bf62-bff9171e4e01	Delete
Your session has entered a bad state. Feel free to contact support for further information.	

Selected applications - [all apps](#)

Jupyter Lab/Notebook

RStudio

Matlab

Ansys FLUENT
Ansys Fluent

Ansys ENSIGHT
Ansys Enight

Ansys WORKBENCH
Ansys Workbench

Perian Shell Access

MetaCentrum Desktop

Job Composer

BIOP Desktop

CLC Genomics WB

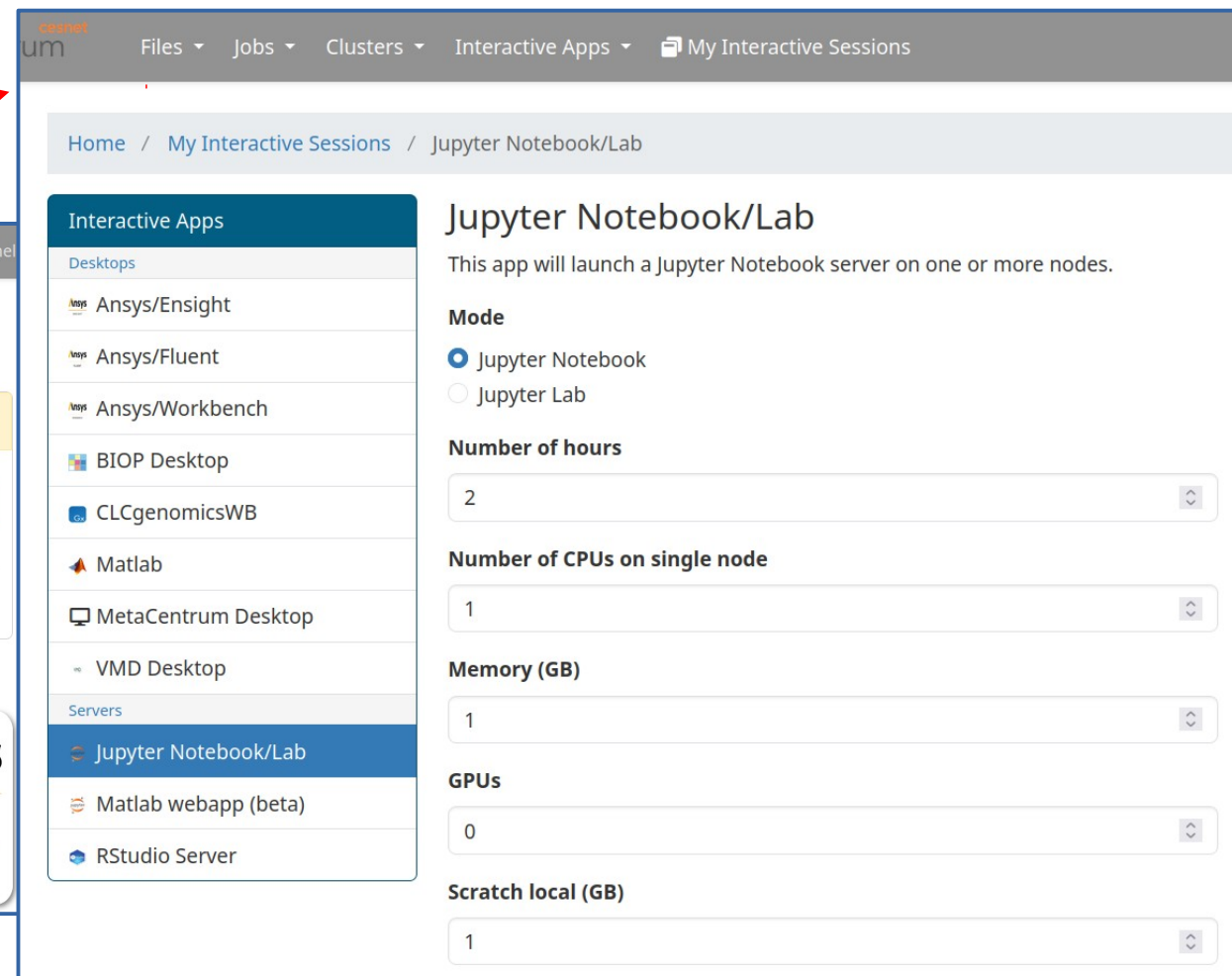
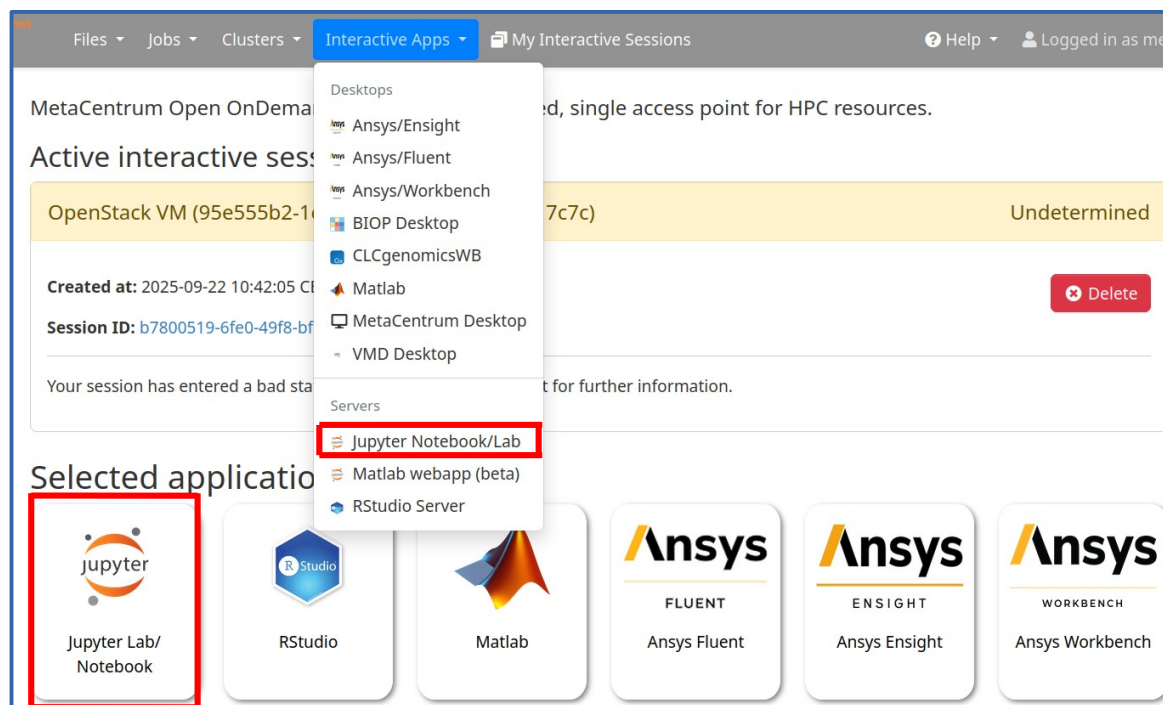
VMD Desktop

Announcements

Spuštění notebooku - volba zdrojů

- čas max. 48 hodin (aktuálně)
- CPU, mem
- max 2 jádra GPU karty

volba zdrojů 1/2



Volba Jupyter image

- MetaCentrum/debianXX.sif
- NGC/PyTorch:XXX.sif
- NGC/TensorFlow:XXX.sif
- RStudio/RStudio-geospatial-XXX.sif

Vlastní Jupyter image

- ve formátu Singularity

Fronta a storage

- pokud nemáte jiný důvod, ponechte frontu “interactive”
- na výběr různé /storage MetaCentra
- tam bude OnDemand odkládat své logy a data (data root directory)

volba zdrojů 2/2

Jupyter Image

RStudio/RStudio-geospatial-4.3.0.SIF

Full path of custom singularity image with Jupyter notebook
PBS Queue

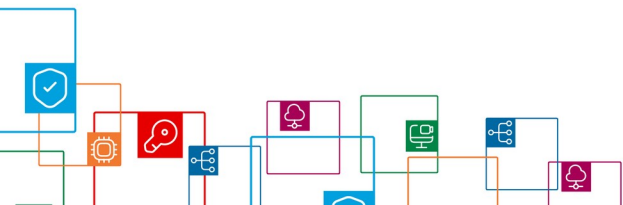
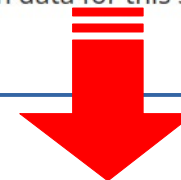
interactive

Jupyter working directory location:

/storage/plzen1

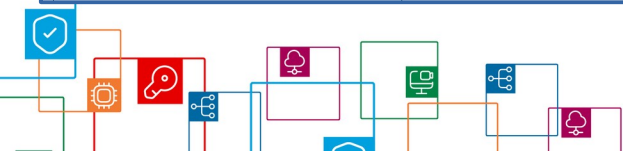
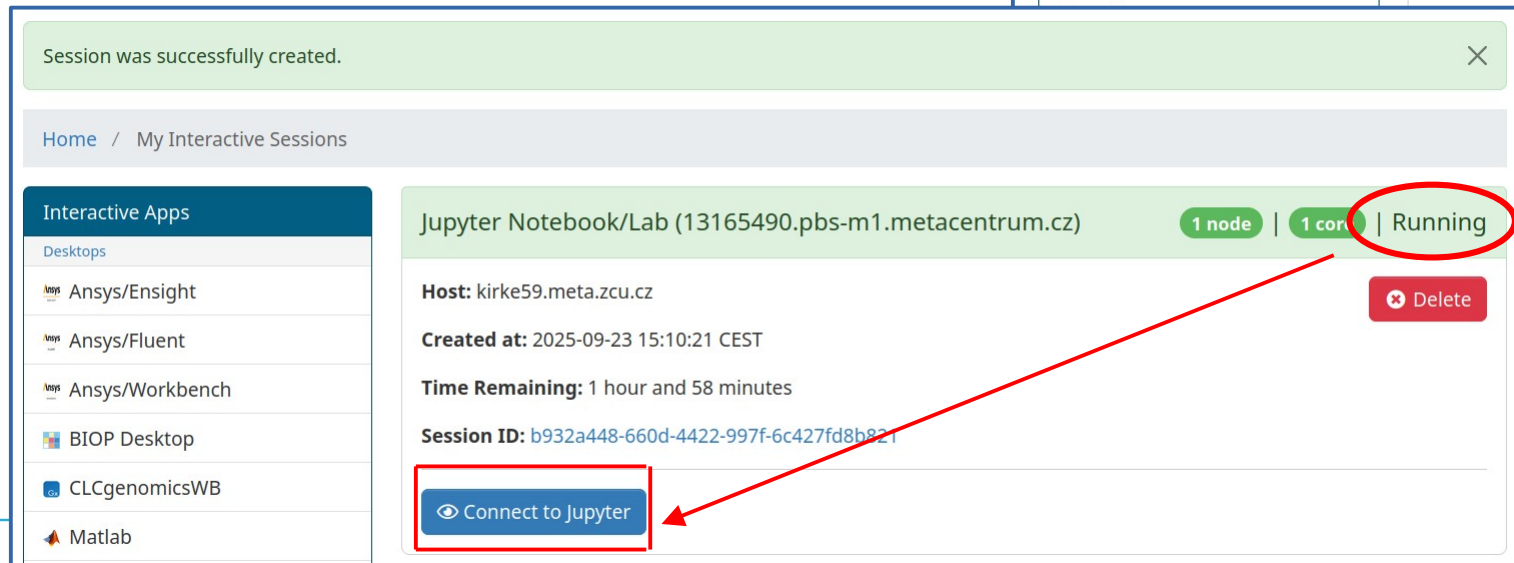
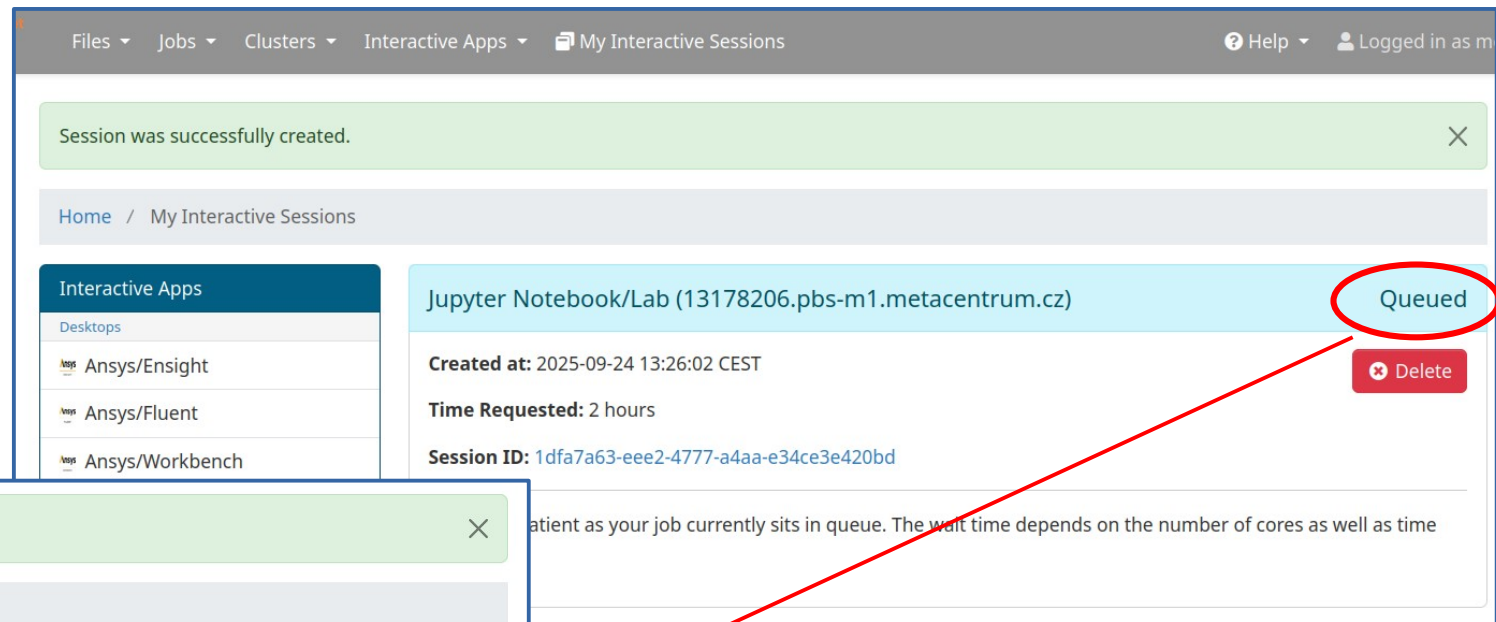
Launch

* The Jupyter Notebook/Lab session data for this session can be accessed under the [data root directory](#).



Spuštění notebooku

- nemusí to být hned (job čeká ve frontě)
- menší požadavky na zdroje
-> rychlejší spuštění



Jupyter Lab - obsah domovského adresáře

data root directory
(pokud adresář neexistuje,
OnDemand si vytvoří nový)

obsah uživatelského domu
ve zvoleném storage, v tomto
případě /storage/plzen1

The screenshot displays the Jupyter Lab interface. On the left, the file browser shows the contents of the home directory. A red box highlights the following files and directories:

Name	Last Modified
BIOVIA_COSMO-RS_TURBO...	10 months ago
ondemand	a year ago
R	a year ago
sdileny	4 years ago
TmoleXProject	10 months ago
file001	2 years ago
lab-a511.jupyterlab-workspace	seconds ago
Untitled.ipynb	3 days ago
Untitled1.ipynb	3 days ago
vnc.log	6 months ago
vnc.passwd	6 months ago
websocketify.log	6 months ago

On the right, the launcher shows options to create a new Notebook or Console, both using Python 3 (ipykernel). At the bottom, there are buttons for Terminal, Text File, Markdown File, Tensorboard, and Show Contextual Help.

Zavření notebooku

- “My Interactive Sessions”
- tlačítko “Delete” (zavření okna ani prohlížeče nestačí)
- též možno přes CLI (qdel jobID)

The screenshot displays the 'My Interactive Sessions' page in the OnDemand web interface. On the left, a sidebar lists 'Interactive Apps' under the 'Desktops' category, including Ansys/Ensignt, Ansys/Fluent, Ansys/Workbench, BIOP Desktop, CLCgenomicsWB, and Matlab. The main area shows a single session titled 'Jupyter Notebook/Lab (13178369.pbs-m1.metacentrum.cz)'. This title is highlighted with a red box, and a red arrow labeled 'jobID' points to it. To the right of the title, the session status is shown as '1 node | 1 core | Running'. Below the title, the session details are listed: 'Host: kirke59.meta.zcu.cz', 'Created at: 2025-09-24 13:53:10 CEST', 'Time Remaining: 1 hour and 59 minutes', and 'Session ID: fc312356-42a8-46d1-a989-e1610dc7af70'. A red 'Delete' button is located in the top right corner of the session details panel. At the bottom of the session details, there is a blue button labeled 'Connect to Jupyter'.

Home / My Interactive Sessions

Interactive Apps

Desktops

- Ansys/Ensignt
- Ansys/Fluent
- Ansys/Workbench
- BIOP Desktop
- CLCgenomicsWB
- Matlab

Jupyter Notebook/Lab (13178369.pbs-m1.metacentrum.cz) 1 node | 1 core | Running

Host: kirke59.meta.zcu.cz

Created at: 2025-09-24 13:53:10 CEST

Time Remaining: 1 hour and 59 minutes

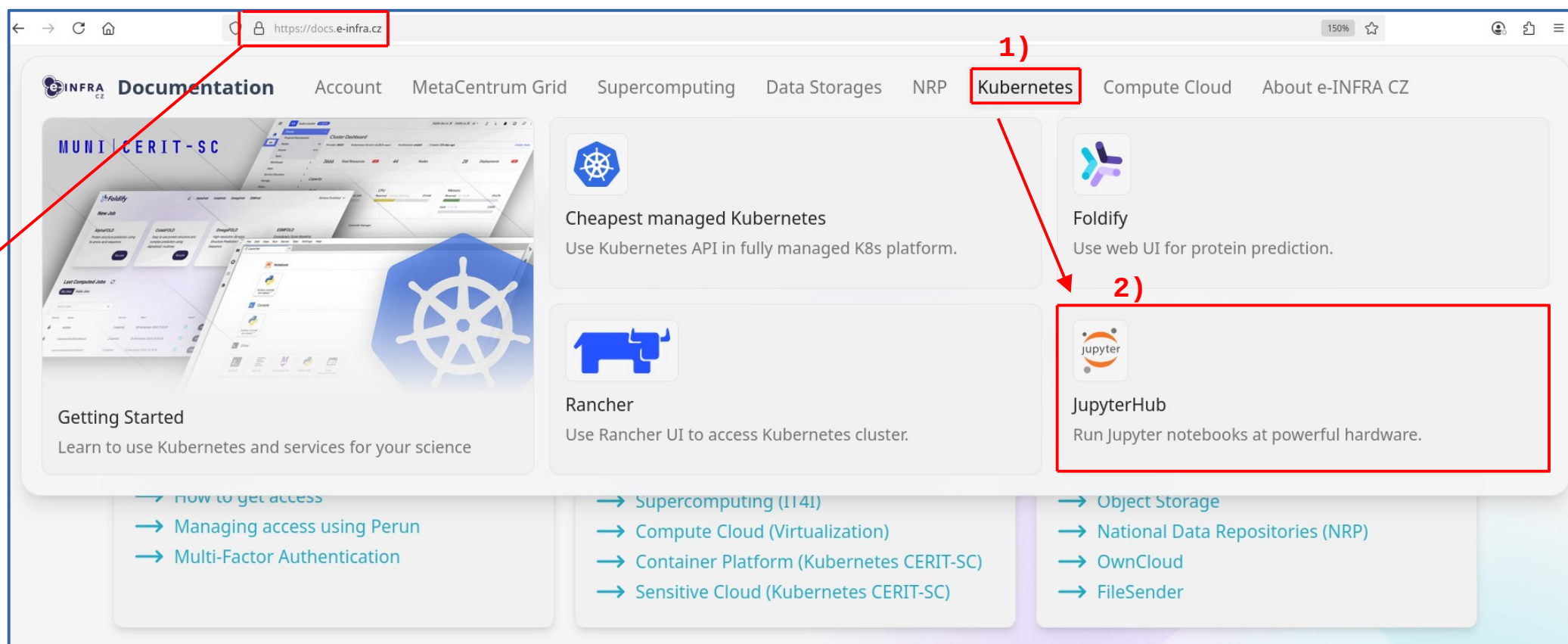
Session ID: fc312356-42a8-46d1-a989-e1610dc7af70

[Connect to Jupyter](#)

[Delete](#)

Kubernetes

- systém pro deployment a škálování kontejnerových aplikací (Docker)
- spravováno týmem CERIT-SC, k8s@cerit-sc.cz, k8s@ics.muni.cz

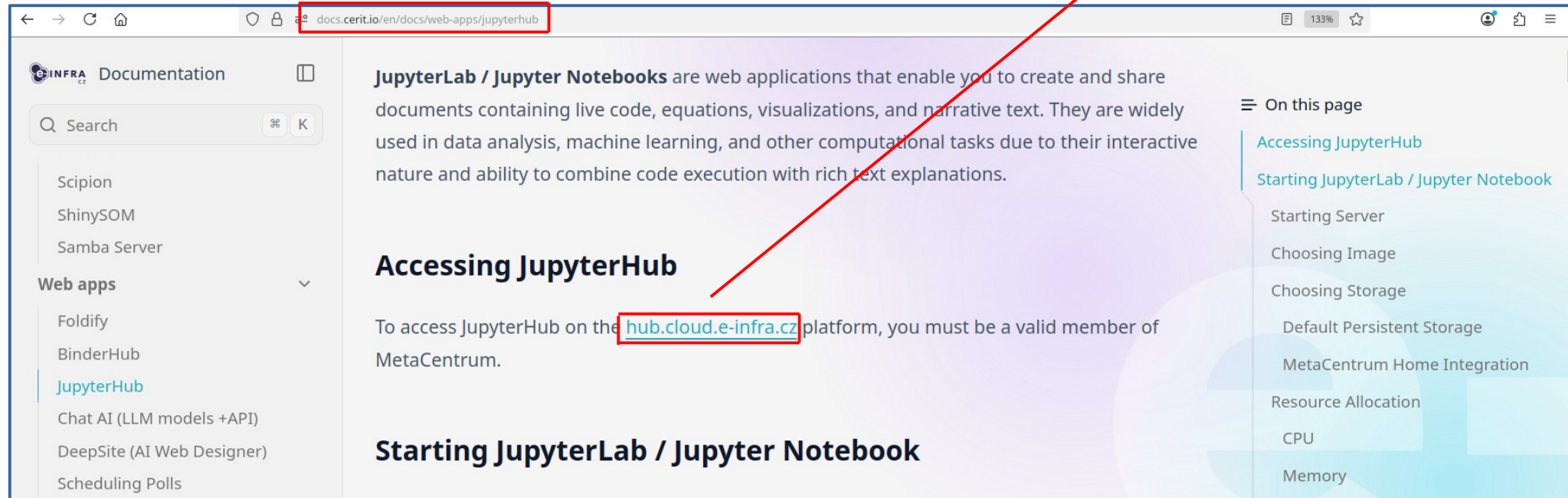


Jupyter Hub/Lab - spuštění

- docs.cerit.io/en/docs -> Web apps -> JupyterHub

docs.cerit.io/en/docs/web-apps/jupyterhub

hub.cloud.e-infra.cz

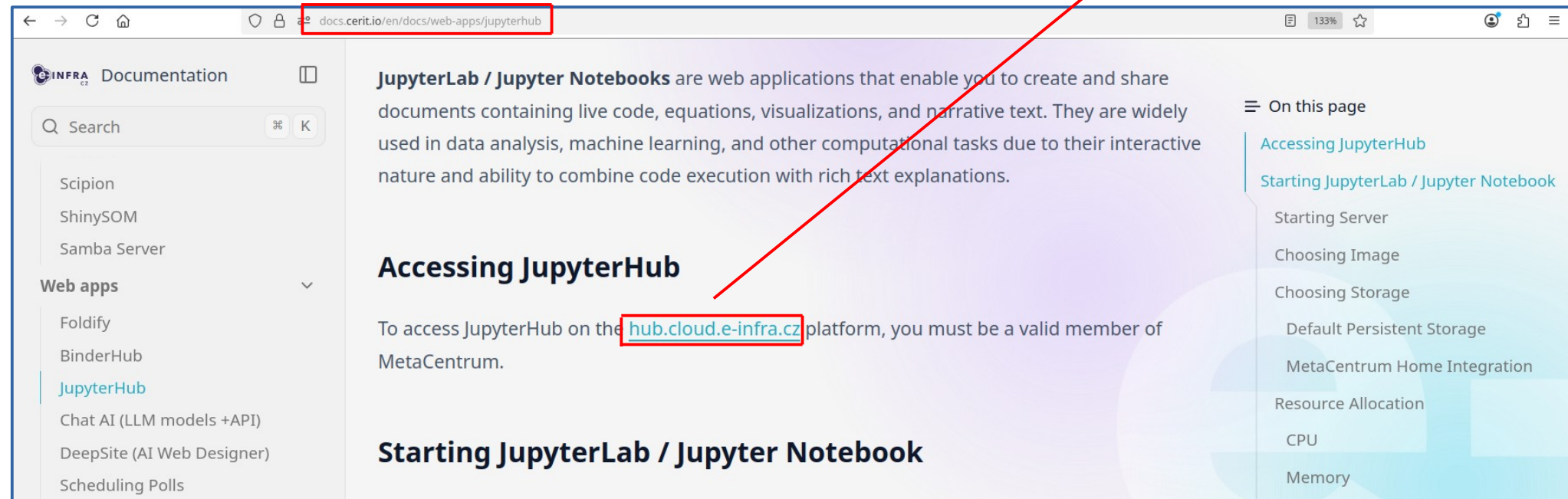
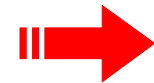


Jupyter Hub/Lab - spuštění

- docs.cerit.io/en/docs -> Web apps -> JupyterHub

docs.cerit.io/en/docs/web-apps/jupyterhub

hub.cloud.e-infra.cz



Jupyter Hub/Lab - volba zdrojů

- zde defaultní nastavení

1)

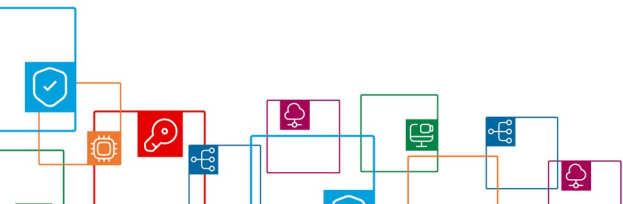
My Server

Named Servers

In addition to your default server, you may have additional 15 server(s) with names. This allows you to have more than one server running at the same time.

Name Your Server - Required! Add New Named Server

MetaCentrum storage server Stopped ▼



Jupyter Hub/Lab - volba zdrojů

- zde defaultní nastavení

1)

My Server

Named Servers

In addition to your default server, you may have additional 15 server(s) with names. This allows you to have more than one server running at the same time.

Name Your Server - Required! Add New Named Server

MetaCentrum storage server

Stopped

2)

Choosing Image

1

2

3

Simple Jupyter Images

R Images

TensorFlow Images

Matlab Images

Various Images

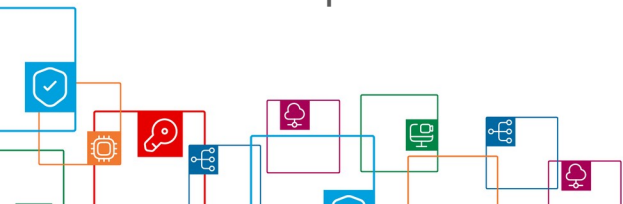
Folding Images

Custom Image ?

☒ Ensure ssh access into the notebook

budete se schopni připojit do notebooku ze své pracovní stanice

3)



Jupyter Hub/Lab - volba zdrojů

- zde defaultní nastavení

1)

My Server

Named Servers

In addition to your default server, you may have additional 15 server(s) with names. This allows you to have more than one server running at the same time.

Name Your Server - Required! Add New Named Server

MetaCentrum storage server

Stopped

2)

Choosing Image

Simple Jupyter Images

R Images

TensorFlow Images

Matlab Images

Various Images

Folding Images

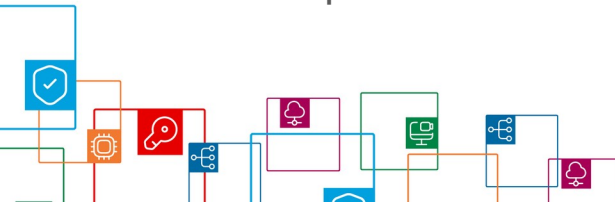
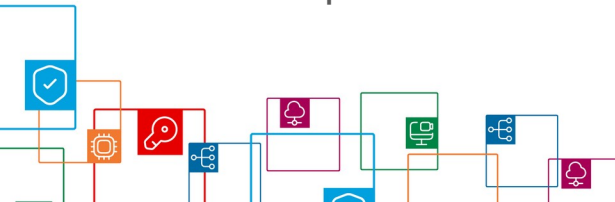
Custom Image

☒ Ensure ssh access into the notebook

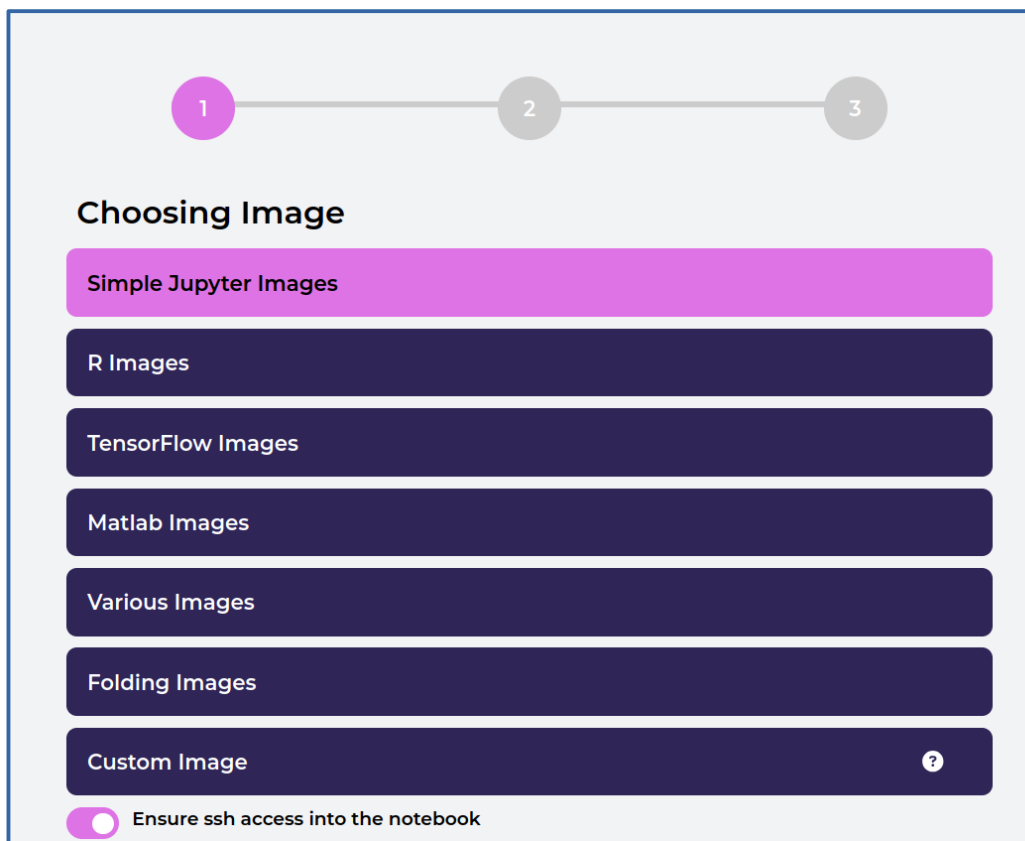
3)

budete se schopni připojit do notebooku ze své pracovní stanice*

pouze v IPv6 síti



Jupyter Hub/Lab - volba image

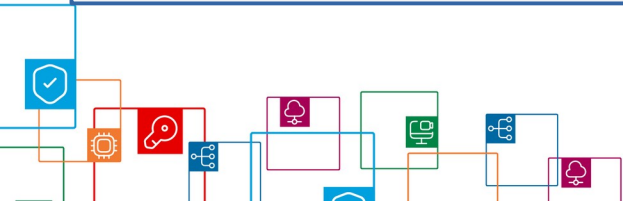


Připravené image

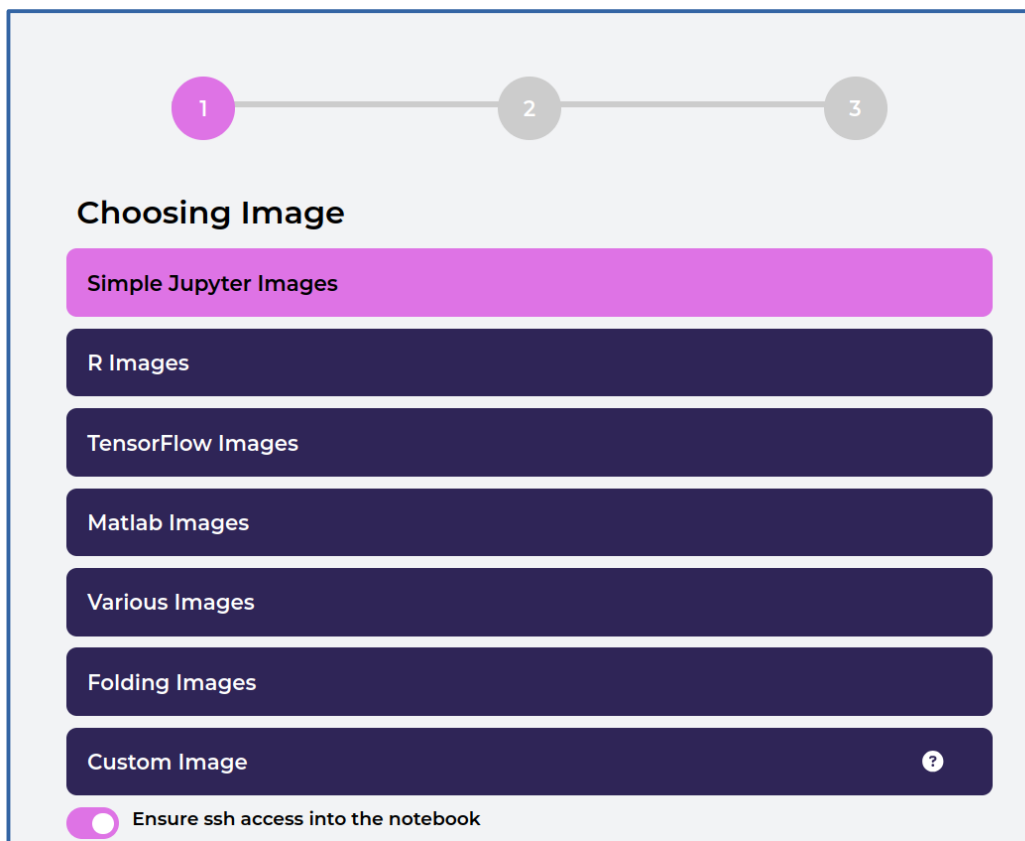
- **Simple Jupyter Images** - základní volba
- **R Images** - různé verze RStudio
- **TensorFlow, Pytorch Images** - pro strojové učení a deep learning
- **Matlab Images** - grafická interaktivní instance Matlabu
- **Folding images** - pro foldingové aplikace (Colabfold, ESM Fold)

Vlastní image

- Docker formát
- vzít existující minimální image a ten si upravit
- úložiště musí být veřejné
- omezení viditelnosti: využít úložiště Harbor; jen uživatelé e-Infra



Jupyter Hub/Lab - volba image

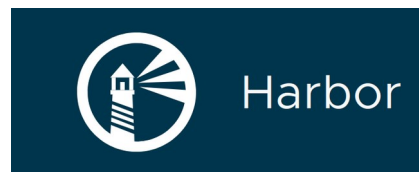


Připravené image

- **Simple Jupyter Images** - základní volba
- **R Images** - různé verze RStudio
- **TensorFlow, Pytorch Images** - pro strojové učení a deep learning
- **Matlab Images** - grafická interaktivní instance Matlabu
- **Folding images** - pro foldingové aplikace (Colabfold, ESM Fold)

Vlastní image

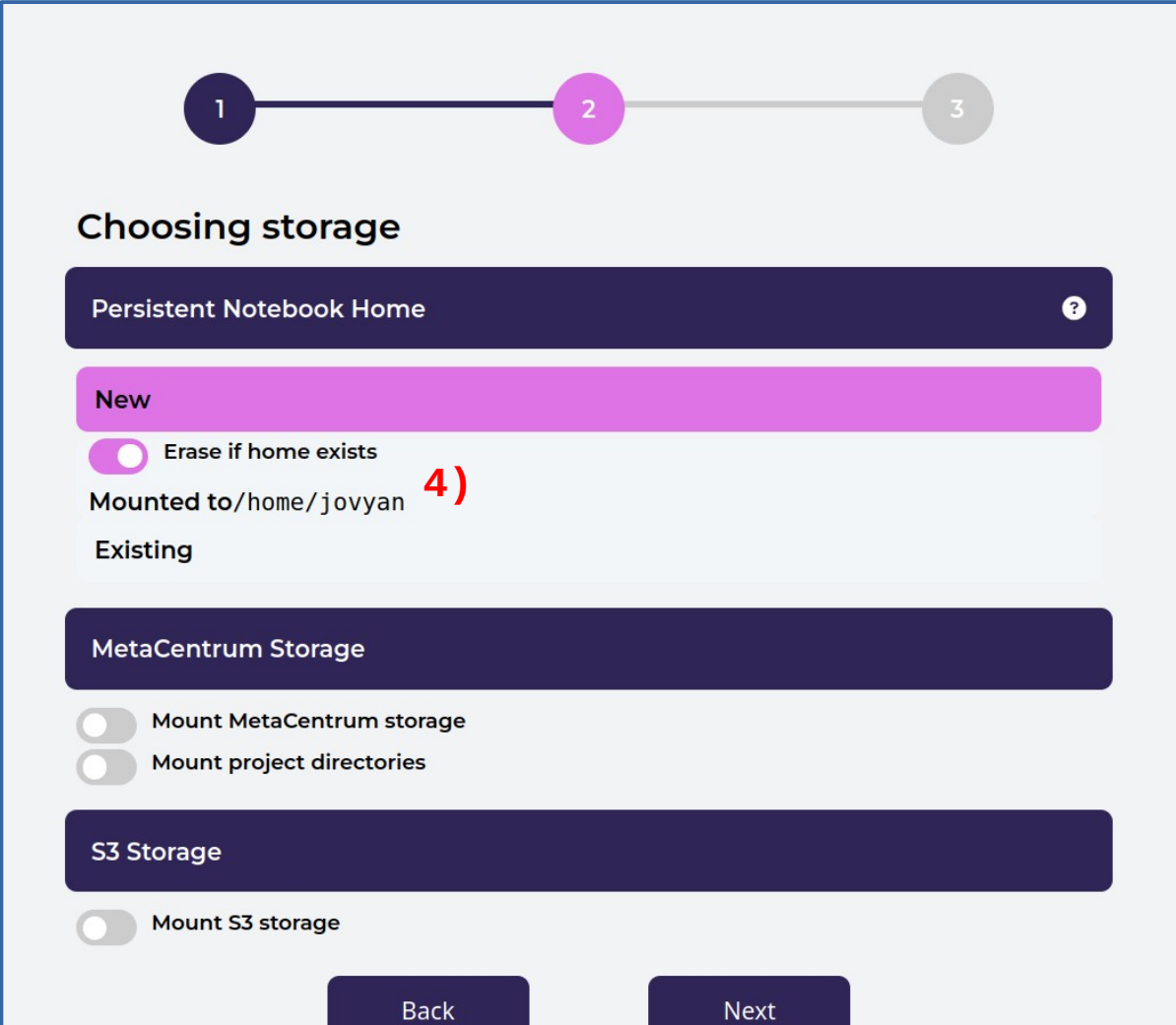
- Docker formát
- vzít existující minimální image a ten si upravit
- úložiště musí být veřejné
- omezení viditelnosti: využít úložiště Harbor; jen uživatelé e-Infra



docs.cerit.io/en/docs/docker/harbor

Jupyter Hub/Lab - volba zdrojů

- dokud server běží, data persistují
- server běží i po zavření prohlížeče



The image shows a step in the JupyterLab installation wizard. At the top, a progress bar has three steps: 1 (dark blue), 2 (pink, current step), and 3 (grey). The main heading is "Choosing storage". Below it, there are three storage options, each in a dark blue box with a question mark icon:

- Persistent Notebook Home**: This option is selected, indicated by a pink bar. Below it, there is a toggle for "Erase if home exists" which is currently off. The text "Mounted to /home/jovyan" is shown, with a red "4)" next to it. Below this, the word "Existing" is visible.
- MetaCentrum Storage**: This option has two toggles, both of which are off: "Mount MetaCentrum storage" and "Mount project directories".
- S3 Storage**: This option has one toggle, "Mount S3 storage", which is also off.

At the bottom right, there are two buttons: "Back" and "Next".

Kubernetes

Defaultní home

Choosing storage

Persistent Notebook Home

New

☐ Erase if home exists

Mounted to /home/jovyan

Settings Help

Terminal 1

```
jovyan@jupyter-melounova:~$ pwd
/home/jovyan
jovyan@jupyter-melounova:~$ ls
jovyan@jupyter-melounova:~$
```

S3 úložiště

S3 Storage

☐ Mount S3 storage

Mounted to /storage/s3

Existing S3 Bucket

New S3 Bucket

Enter S3 URL:

https://s3.cloud.e-infra.cz

Enter S3 Bucket Name:

example-bucket

Enter S3 Access Key:

s3AccessKey

Enter S3 Secret Key:

s3SecretKey

MetaCentrum Storage

MetaCentrum Storage

☐ Mount MetaCentrum storage

Mounted to /home/meta/username

plzen1

☐ Mount selected home to /storage/plzen1/home/melounova

☐ Mount project directories

Settings Help

Terminal 1

```
jovyan@jupyter-melounova--metacentrum-storage-server---1f1861e1:~$ ls
melounova
jovyan@jupyter-melounova--metacentrum-storage-server---1f1861e1:~$ cd melounova
jovyan@jupyter-melounova--metacentrum-storage-server---1f1861e1:~/melounova$ ls
BIOVIA_COSMO-RS_TURBOMOLE  ondemand  sdileny    Untitled1.ipynb  vnc.log      websockify.log
file001                    R          TmoleXProject  Untitled.ipynb   vnc.passwd
jovyan@jupyter-melounova--metacentrum-storage-server---1f1861e1:~/melounova$
```

obsah mého domovského adresáře na úložišti /storage/plzen1

Jupyter Hub/Lab - volba zdrojů

1

2

3

Resources

The notebook is spawned only when one node fulfills all your requirements

5)

CPU

Select CPU limit:

1

4

6

8

10

16

24

32

48

64

8

96

6)

Memory

Select memory limit (in GB):

4

8

16

32

64

128

256

512

768

1024

7)

GPU

?

By default, no GPU is assigned.

None

None

10GB part A100

20GB part A100

whole A10

whole A40

whole A100

whole H100 (80GB)

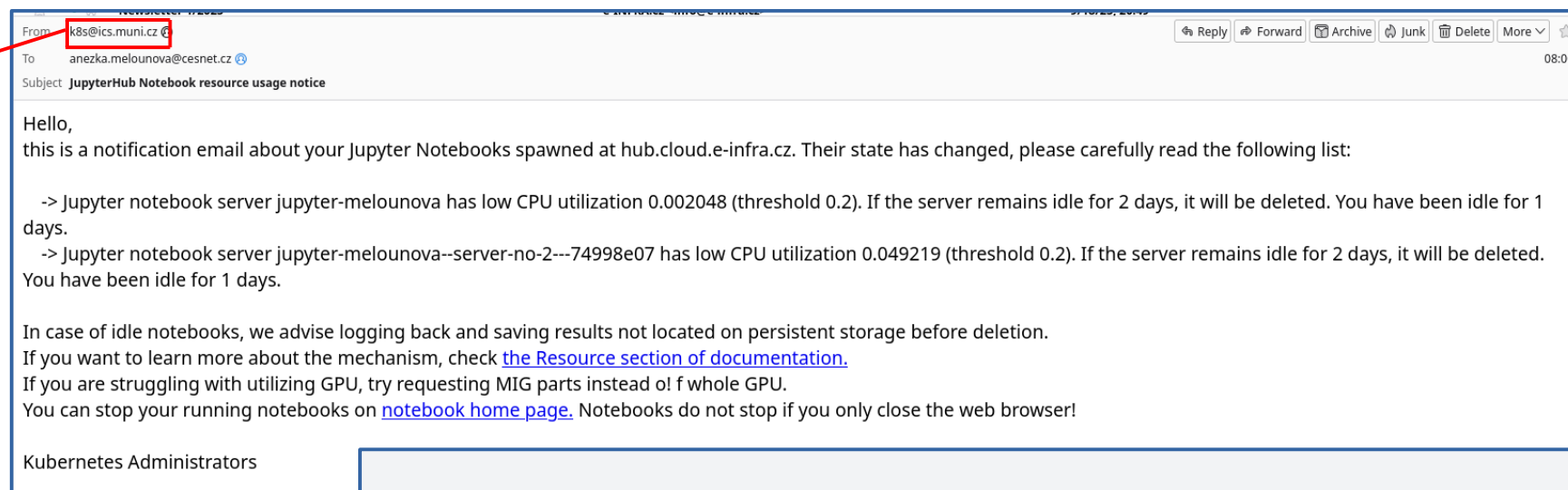
whole H100 (94GB)

any whole gpu

Řízení zdrojů

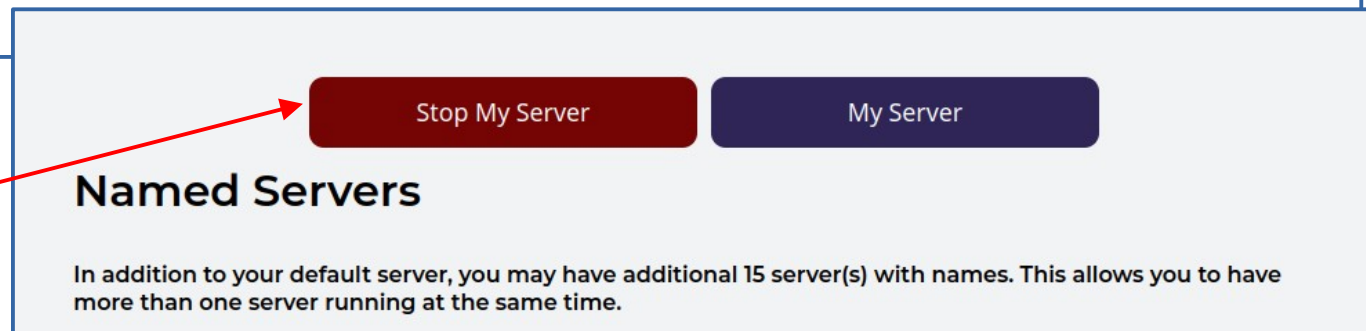
- překročení CPU - výpočet přiškrcen, ale pokračuje
- překročení paměti - jobkill
- čas práce s notebookem není omezen, ale kontroluje se využití CPU nebo GPU (notebook ve stavu idle)
- méně než <threshold value> CPU po dobu déle než 4 dnů, nebo idle GPU do po dobu dvou dnů -> smazán

k8s@ics.muni.cz



Zastavení notebooku (serveru)

- pro zastavení notebooku nestačí zavřít prohlížeč
je nutné zvolit Stop my server



AI chat support

- všechny připravené image obsahují tuto variantu
- pomoc s kódováním
- limitovaný počet dotazů, data posílána třetí straně
- server běží i po zavření prohlížeče

Spuštění jobu z notebooku

- pokud výpočetní nároky přesahují specifikaci notebooku, lze část skriptu spustit jako job

SSH připojení k notebooku

- pouze na IPv6 síti

Srovnání rozdílů OnDemand vs Kubernetes

	OnDemand	Kubernetes
čas běhu	vybírá uživatel předem; max 48 hodin	není určen předem; “dokud se počítá, notebook běží”
překročení CPU	jobkill	throttle
překročení mem	jobkill	jobkill
překročení času	jobkill	pouze pro stav idle
nízké využití/nečinnost notebooku	nic; nechá se vypršet čas	warning, s odstupem jobkill
pracovní adresář	některý ze /storage MetaCentra	1) úložný prostor v cloudu, 2) některý ze /storage MetaCentra, 3) S3 úložiště
možnost vlastního Jupyter ntb image	ano; Singularity	ano; Docker

