

MetaCentrum a náročné (nejen matematické) výpočty

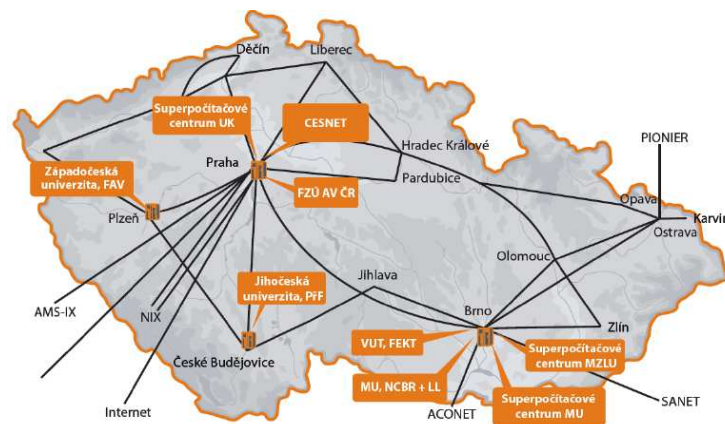
Tomáš Rebok

MetaCentrum NGI, CESNET z.s.p.o.

(rebok@ics.muni.cz)

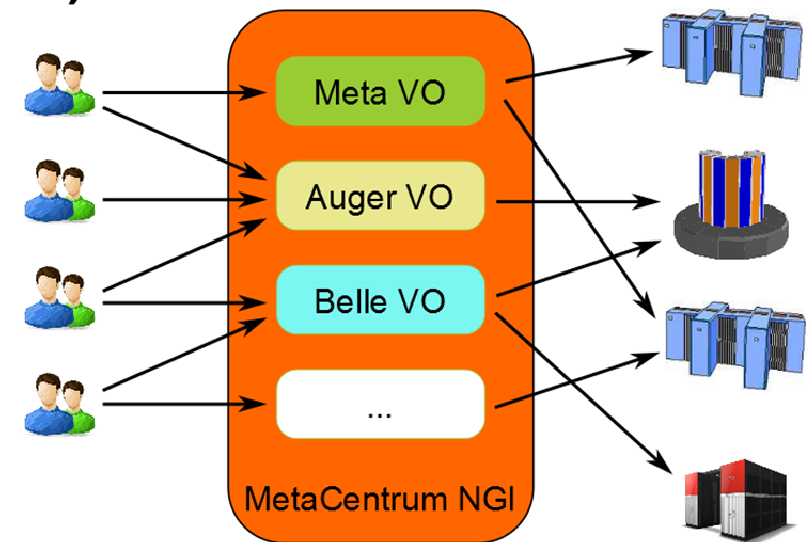
MetaCentrum @ CESNET

- výzkumná aktivita sdružení CESNET
- od roku 1996 provozuje národní gridovou infrastrukturu
 - zahrnuje **clustery** a **výkonné servery** poskytované sdružením CESNET a spolupracujícími univerzitami (ZČU, UK, MU)
 - připojeny i clustery vlastněné dalšími organizacemi (CEITEC, JČU, VUTBR, ...)
 - napojena do evropských gridových infrastruktur (EGI)



MetaCentrum NGI

- koordinátor národní gridové infrastruktury
- uživatele sdružuje do tzv. **virtuálních organizací (VO)**
 - skupina uživatelů, kteří mají „něco společného“
 - např. spolupráce na stejném projektu
 - může mít vlastní zdroje, vlastní politiky, vlastní technologie, atp.
- **může pomoci s/se:**
 - *založením vlastního centra*
 - know-how
 - využití zdrojů CESNETu pro rychlejší založení
 - *založením vlastní VO*
 - zprostředkování dohod mezi VO a poskytovateli zdrojů
 - technická výpomoc, pomoc při definici politik
 - *integrací vlastních zdrojů do gridového prostředí*
 - oblast přetečení výpočetních úloh
 - (priorita pro vlastníky zdrojů)
 - *zapojením projektu do evropských infrastruktur*
 - např. VO Auger, Belle, SuperNemo v EGI, ...



<http://www.metacentrum.cz>

MetaCentrum VO (Meta VO)

- přístupné zaměstnancům a studentům VŠ/univerzit, AV ČR, výzkumným ústavům, atp.
- nabízí: <http://metavo.metacentrum.cz>
 - výpočetní zdroje
 - aplikační programy
 - úložné kapacity
- součást budované e-infrastruktury CESNETu
 - datová úložiště, kolaborativní prostředí, ...
- k dispozici **zcela zdarma**
 - „placení“ formou publikací s poděkováním
 - → prioritizace uživatelů při plném vytížení zdrojů



Meta VO – hardware

- **3500 jader**, cca polovina vlastněná CESNETem
 - klasické HD uzly (2x4-8 jader) i SMP stroje (32-80 jader)
 - paměť až 512 GB per uzel
 - Infiniband pro nízkolatenční komunikaci (MPI)
- **300 TB** pro semipermanentní data
 - úložiště v Brně a Plzni, přístupné na všech clusterech
 - výhledově napojení na **PB** úložiště permanentních dat
- na jednotlivých clusterech může být „exotičtější“ vybavení
 - NVIDIA CUDA karty v Plzni
 - sdílený „scratch filesystem“ v Brně (35 TB pro dočasná data)

Meta VO – software

- průběžně udržované **vývojové prostředí**
 - GNU, Intel, PGI
 - ladící a optimalizační nástroje (TotalView, Allinea)
- generický **matematický software**
 - Matlab, Maple, gridMathematica
- komerční i volný **software pro aplikační chemii**
 - Gaussian 09, Amber, Gamess, ...
- **materiálové simulace**
 - Wien2k, Fluent (zatím jen ZČU)
- **strukturní biologie, bioinformatika**
 - řada volně dostupných balíků
- viz <http://meta.cesnet.cz/wiki/Kategorie:Aplikace>
- hledáme náměty na další sdílitelný/generický software

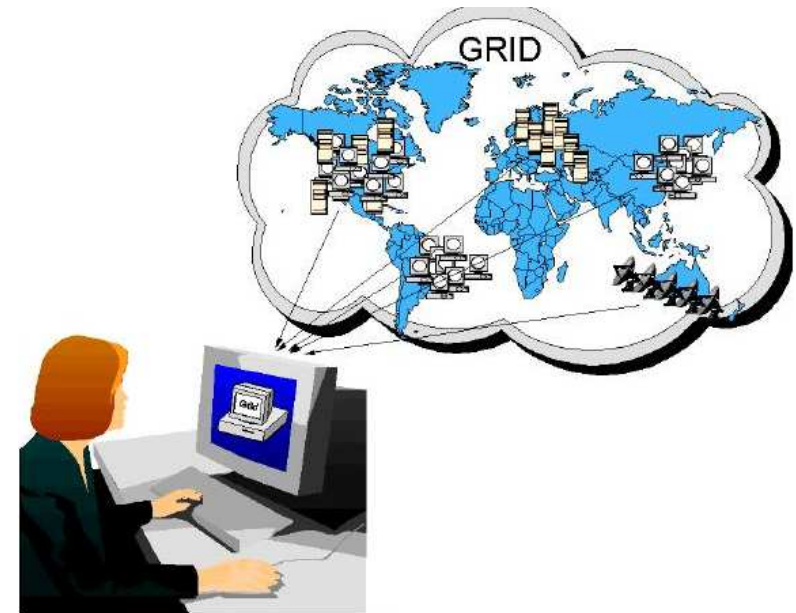
Meta VO – Matlab & toolboxes

■ MATLAB (250), Simulink (150)

- Bioinformatics_Toolbox 10
- Communication_Toolbox 25
- Compiler 7
- Control_Toolbox 50
- Curve_Fitting_Toolbox 50
- Data_Acq_Toolbox 2
- Database_Toolbox 9
- Datafeed_Toolbox 1
- Distrib_Computing_Toolbox 15
- Econometrics_Toolbox 1
- Embedded_IDE_Link 1
- Excel_Link 1
- Fin_Derivatives_Toolbox 2
- Financial_Toolbox 2
- Fixed_Income_Toolbox 1
- Fixed-Point_Blocks 1
- Fixed_Point_Toolbox 1
- Fuzzy_Toolbox 51
- GADS_Toolbox 1
- Identification_Toolbox 51
- Image_Acquisition_Toolbox 2
- Image_Toolbox 26
- Instr_Control_Toolbox 1
- MATLAB_Builder_for_Java 5
- MATLAB_Coder 7
- MATLAB_Distrib_Comp_Engine 32
- Neural_Network_Toolbox 150
- Optimization_Toolbox 150
- PDE_Toolbox 50
- Power_System_Blocks 1
- Real-Time_Workshop 2
- RTW_Embedded_Coder 1
- Signal_Blocks 50
- Signal_Toolbox 50
- SimHydraulics 1
- SimMechanics 4
- Simscape 5
- Simulink_Control_Design 50
- Simulink_HDL_Coder 1
- Statistics_Toolbox 50
- Symbolic_Toolbox 150
- Target_Support_Package 1
- Vehicle_Network_Toolbox 1
- Video_and_Image_Blockset 1
- Virtual_Reality_Toolbox 3
- Wavelet_Toolbox 4
- viz <http://meta.cesnet.cz/wiki/Matlab>

Meta VO – výpočetní prostředí

- *dávkové úlohy*
 - popisný skript úlohy
 - oznámení startu a ukončení úlohy
- *interaktivní úlohy*
 - **textový i grafický režim**
- *cloudové rozhraní* (novinka)
 - pilotní instalace s CERIT-SC
 - základní kompatibilita s Amazon EC2
 - uživatelé **nespouští úlohy, ale virtuální stroje**
 - opět zaměřeno na vědecké výpočty
 - možnost vyladit si obraz a přenést ho do MetaCentra (Windows, Linux)
 - podpora pro aplikace, kterým gridový přístup nevyhovuje



Meta VO – motivace k zapojení

- *malá skupina bez vlastního hardware*
 - výpočty na zdrojích Meta VO
 - možnost vyzkoušet si hardware před případným nákupem
 - aplikační prostředí Meta VO
- *projekt s vlastním clusterem*
 - pomoc při nákupu, správě, vytížení
 - oblast přetečení pro vlastní výpočty
 - priorita pro vlastníky hardware
- *méně častý hardware*
 - velké SMP stroje, CUDA, sdílený scratch
- *pomoc při přenesení výpočtů na grid*
 - spolupráce na výzkumných aktivitách uživatelů (CERIT-SC)



Děkuji Vám za pozornost!

