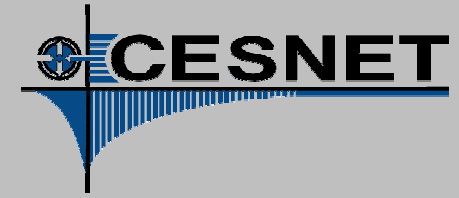


MetaCentrum



Czech National e-Infrastructure

MetaCentrum

Aktuální stav a nové služby

Jan Kmuníček

CESNET

meta.cesnet.cz

- **Infrastruktura**
- **Služby**
 - výpočetní servis
 - úložné kapacity
 - síťová spojení
 - prostředí pro spolupráci
- **Aplikace**
- **Projekty**
- **Další vývoj**



- **MetaCentrum je klíčová aktivita CESNETu**
 - reprezentuje **českou národní e-Infrastrukturu**
 - složeno z různých výpočetních a úložných zdrojů sdílených na různých úrovních
- **K 31. říjnu 2009 celkově cca 1400 CPU (jader)**
- **Plus cca 1500 jader zapojených do EGEE**
 - zdroje z Fyzikálního ústavu, které podporují řadu EGEE virtuálních organizací



- **Vlastní zdroje CESNETu**
- **Zdroje zapojených organizací jsou sdíleny v různé míře**
 - neomezený přístup, sdíleny s každým univerzitní superpočítačová centra
 - částečně omezený přístup
specifická pravidla využití/prioritizace vlastníků
 - exkluzivní přístup
řízen MetaCentrem



- **CESNET**
- **SCB, Masarykova univerzita, Brno**
 - Ústav výpočetní techniky
 - Fakulta informatiky
 - NCBR, ústav PŘF
 - Loschmidt Laboratories, Ústav experimentální biologie PŘF
- **SC, Univerzita Karlova, Praha**
- **ZSC, Západočeská univerzita, Plzeň**
- **PŘF, Jihočeská univerzita, České Budějovice**
- **FEKT, Vysoké učení technické, Brno**
 - Ústav teoretické a experimentální elektrotechniky
 - Ústav biomedicínského inženýrství
- **SC, Ústav nauky o dřevě, MZLU, Brno**



- **Stav k 31.10.2009**
- **1468 CPU, z toho**
 - 1221 i386,x86_64 s volným přístupem
 - 82 Itanium2 a MIPS s volným přístupem
 - 78 i386,x86_64 vyhrazeno vlastníkům
 - 81 vyhrazeno pro EGEE
 - 6 řídicí a testovací stroje
- **15 clusterů a 5 SMP strojů umístěných v Brně, Praze, Plzni a Českých Budějovicích**

- **Sjednocené prostředí**

- jedna přihláška
- jedno přihlašovací jméno a jedno heslo

- systém plánování úloh
- sdílené souborové systémy
- systém správy účtů

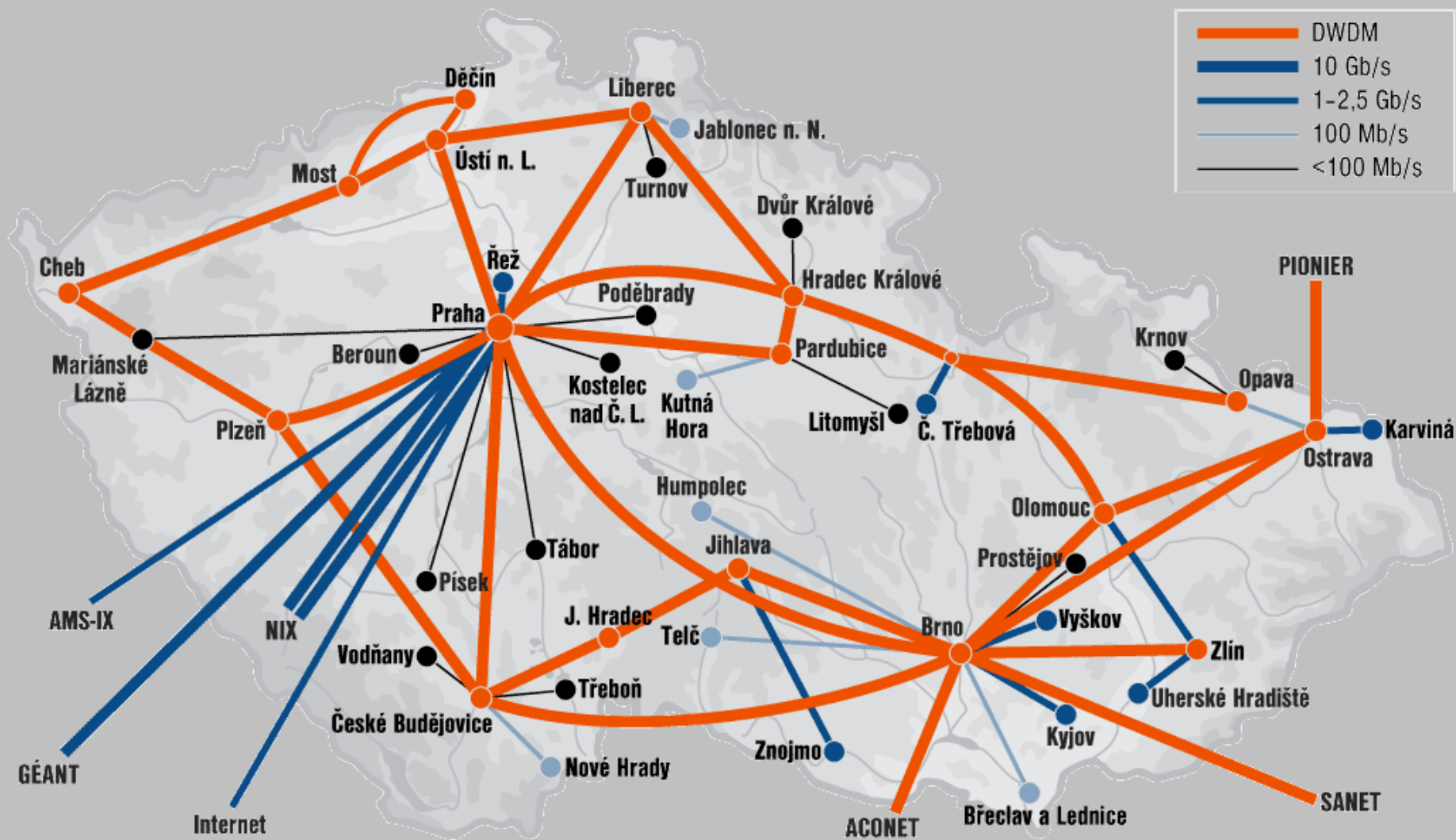
- jeden portál
- jedna komunikační adresa

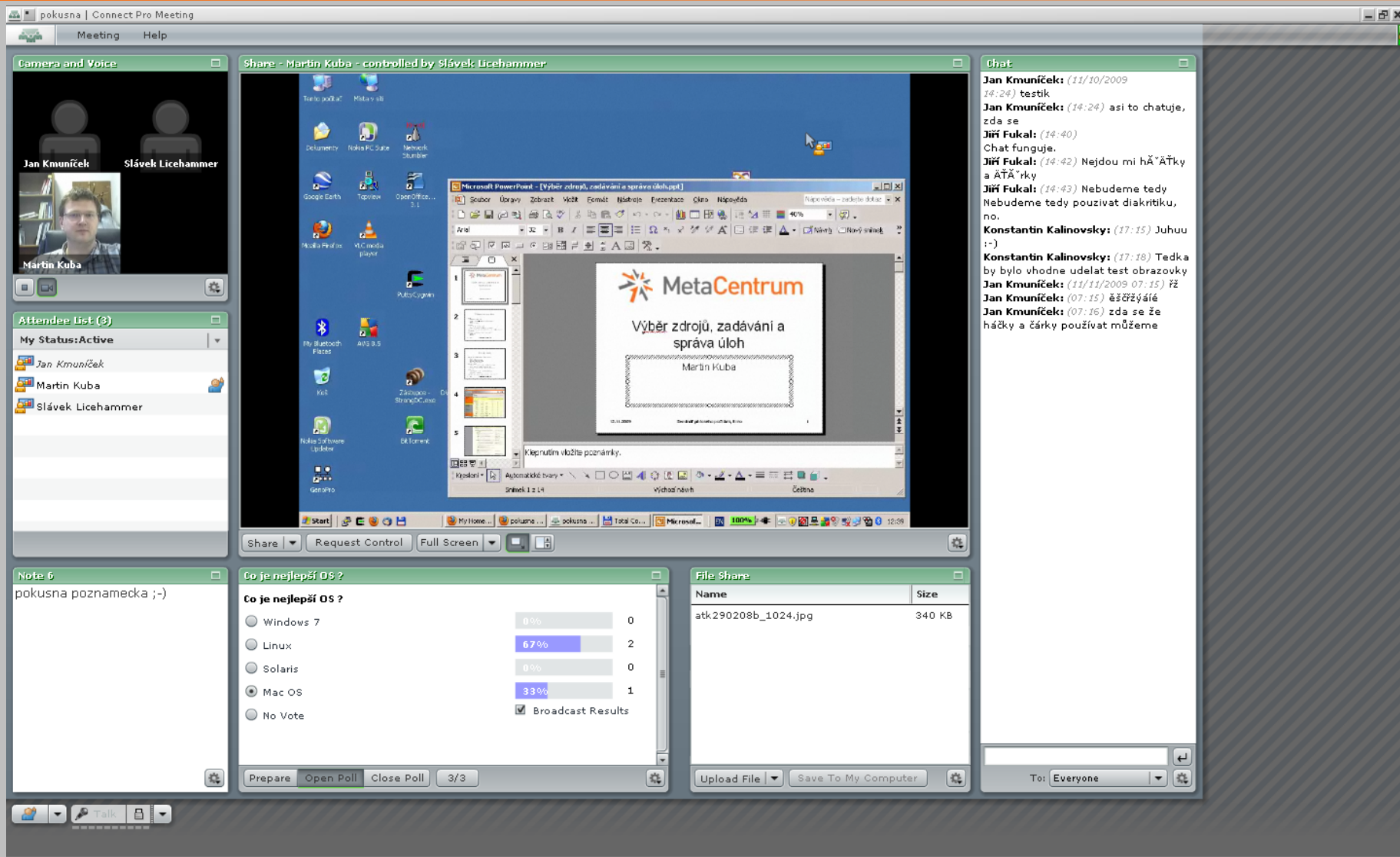
výpočetní servis
úložné kapacity

meta.cesnet.cz
meta@cesnet.cz



Czech National e-Infrastructure





The screenshot displays a Connect Pro Meeting window titled 'pokusna | Connect Pro Meeting'. The interface is divided into several panels:

- Camera and Voice:** Shows video feeds for participants Jan Kmuniček, Slávek Licehammer, and Martin Kuba.
- Attendee List (3):** Lists active participants: Jan Kmuniček, Martin Kuba, and Slávek Licehammer.
- Share - Martin Kuba - controlled by Slávek Licehammer:** Displays a shared desktop environment. A Microsoft PowerPoint window is open, showing a slide titled 'Výběr zdrojů, zadávání a správa úloh' (Selection of sources, assignment and task management) by Martin Kuba. The slide content includes:
 - MetaCentrum logo
 - Výběr zdrojů, zadávání a správa úloh
 - Martin Kuba
 - 10.11.2009
 - 1. Káprutům vložit poznámky.
- Chat:** A chat window with messages from participants:
 - Jan Kmuniček: (11/10/2009 14:24) testik
 - Jan Kmuniček: (14:24) asi to chatuje, zda se
 - Jiří Fukal: (14:40) Chat funguje.
 - Jiří Fukal: (14:42) Nejdou mi háčkové a čárky
 - Jiří Fukal: (14:43) Nebudeme tedy Nebudeme tedy používat diakritiku, no.
 - Konstantin Kalinovsky: (17:15) Juhuu :-)
 - Konstantin Kalinovsky: (17:18) Tedka by bylo vhodné udelat test obrazovky
 - Jan Kmuniček: (11/11/2009 07:15) řř
 - Jan Kmuniček: (07:15) řřřřřřřř
 - Jan Kmuniček: (07:16) zda se že háčky a čárky používat můžeme
- Note 6:** A note field containing 'pokusna poznamacka ;-)'
- Co je nejlepší OS?:** A poll window titled 'Co je nejlepší OS?'. The results are:

OS	Percentage	Count
Windows 7	0%	0
Linux	67%	2
Solaris	0%	0
Mac OS	33%	1
No Vote	-	-
- File Share:** A file share window showing a table of files:

Name	Size
atk290208b_1024.jpg	340 KB

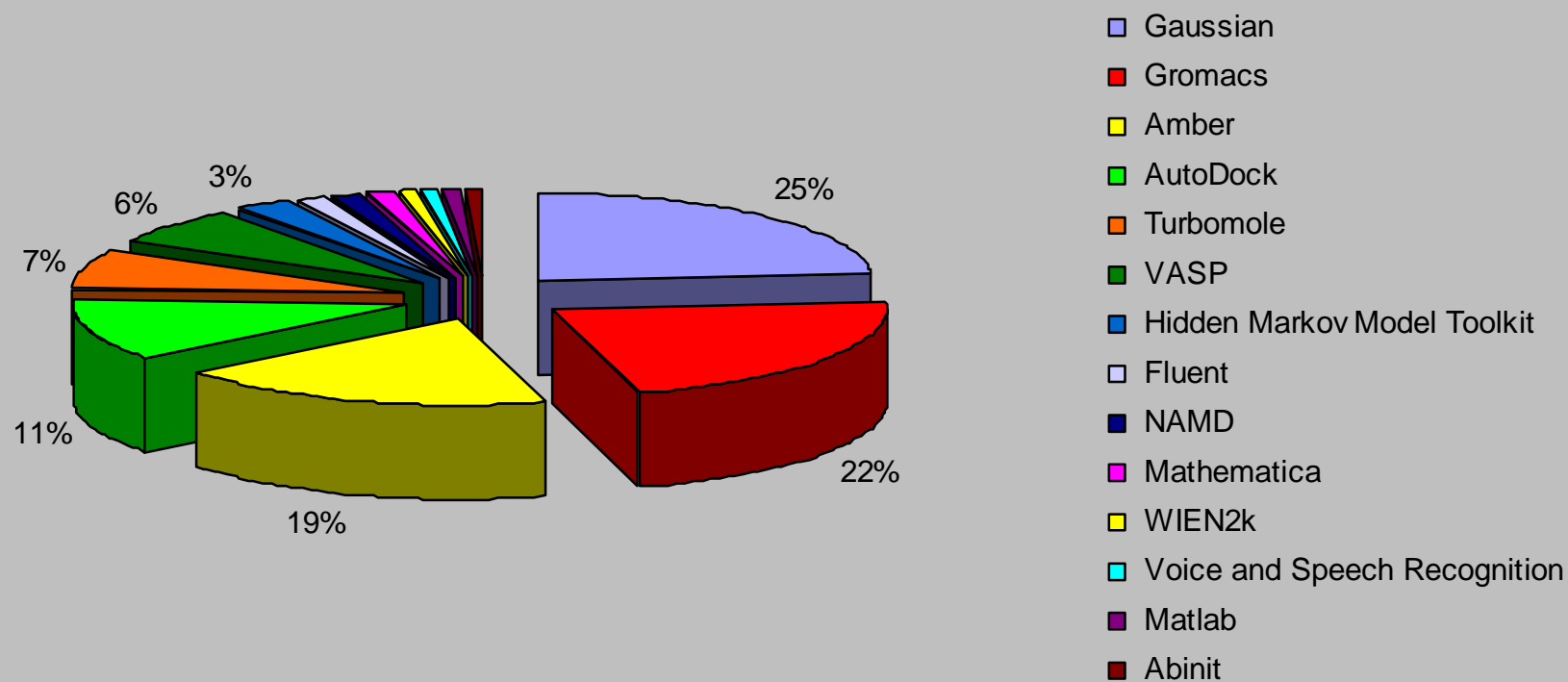


- **Všichni akademičtí zaměstnanci a studenti** mohou být uživateli MetaCentra
- **Vlastníci zdrojů mají ke svým zdrojům prioritní nebo exkluzivní přístup**
- **Všichni uživatelé mohou využívat dostupné zdroje vlastněné ostatními nebo použít tzv. „neutrální“ zdroje CESNETu**



- Výpočetní chemie
- Materiálové a strukturní simulace
- Simulace proudění
- Rozpoznávání a generování řeči
- Fyzikální geodézie
- Ekologické modelování
- Zpracování videa
- Data mining
- Analýza medicínského obrazu

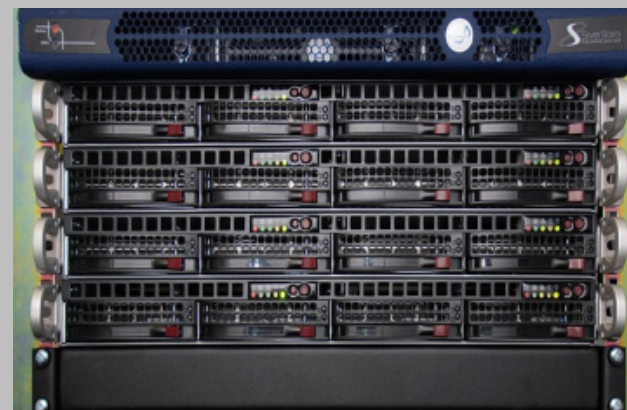
- **Aplikační programy**
 - období 1. 1. 2009–31. 10. 2009



- **Leden 2009 – hermes**
 - PŘF, Jihočeská univerzita
České Budějovice
10 uzlů 1x quad-core Xeon
16 GB RAM
- **Únor 2009 – nympa**
 - Západočeská univerzita, Plzeň
20 uzlů 2x quad-core Xeon
16 GB RAM



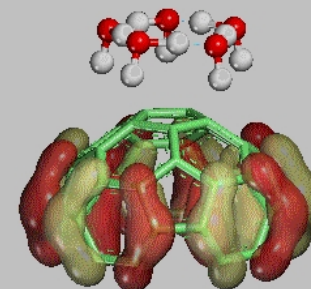
- **Květen 2009 – alela**
 - Ústav biomedicínského inženýrství FEKT VUT
 - 8 uzlů 2x quad-core Xeon
 - 8 GB a 32 GB RAM
- **Říjen 2009 – eru**
 - CESNET
 - 2 uzly 8x quad-core Opteron
 - 128 GB a 256 GB RAM



- Clustery perian (266 CPU) a orca (72 CPU) patřící NCBR byly v srpnu zpřístupněny všem uživatelům
- Vlastníci mají zachovanou prioritu
 - na perian prioritní fronty **ncbr** a **cpmd**
 - na orca pomocí preempce mohou úlohy ve druhém virtuálním stroji pozastavit úlohy v prvním virtuálním stroji

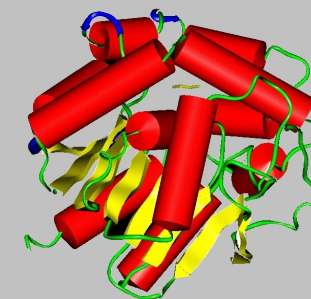
- **Výpočetní chemie**

- § Gromacs molekulová dynamika
- § PC Gamess DFT a ab-initio výpočty
- § Gamess-US ab-initio QM výpočty
- § VASP ab-initio QM molekulová dynamika
- § Tinker molekulárně modelovací sada
- § NAMD paralelní molekulová dynamika



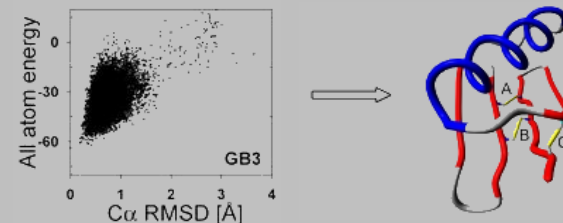
- **Medicínské programy**

- § FSL FMRI, MRI a DTI analýza
zobrazovacích dat mozku



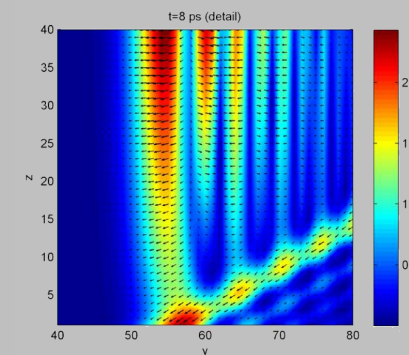
- **Strukturní biologie**

- § MrBayes odhad fylogeneze
- § Queen hodnocení NMR parametrů
- § X-PLOR 3D struktura makromolekul



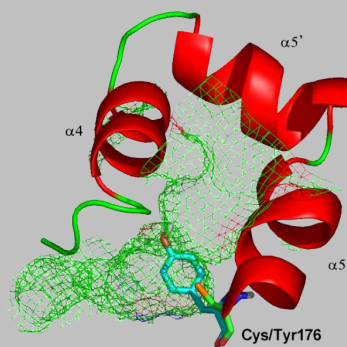
- **Matematika a statistika**

- § Grace vizualizace grafů
- § R (update) statistické výpočty a grafika
- § NumPy rozšíření jazyka Python pro číselná pole a matice
- § SciPy rozšíření Numpy o řízení signálů, optimalizaci a statistiku



- **Plánované programy**

- § Gaussian 09 elektronická struktura molekul
- § Abinit elektronická struktura krystalů
- § FHI-aims molekulární simulace založené
na lokálních orbitalech
- § AutoDock Vina molekulární docking
a virtuální screening molekul



- **Současné projekty**

- EGEE globální infrastruktura
- EUAsiaGrid šíření gridového know-how
- EGI DS vybudování trvale udržitelného gridu
- EPIKH program výměny znalosti
- MediGrid národní biomedicínský projekt



- **Dokončené projekty**

- Ithonet, EuroCareCF
- GRIDLAB, DATAGRID, CoreGRID



- **Národní prostředí**
 - Projekt „Velká Infrastruktura“ jako zastřešující
 - § CESNET národní grid (MetaCentrum)
datová úložiště, síť,
 - § CERIT cca 6 000 jader v clusterech
cca 6 000 jader v SMP
 - § IT for Innovations superpočítač v Ostravě
- **Mezinárodní prostředí**
 - EGEE transformace do EGI
 - § CESNET reprezentantem „Czech NGI“