Kubernetes pro výpočty a vědu, aneb co děláme v temnotách

Lukáš Hejtmánek
e-INFRA CZ/CERIT-SC

Prostředí Kubernetes

- Provozováno centrem CERIT-SC v rámci e-INFRA CZ
  - K využití stačí účet v Metacentru
- Vybavení
  - přes 2000 CPU jader
  - 512GB paměti na uzel
  - GPU karty
    - A10, A40, A100 (80GB), A100 MIG, H100
  - Pouze SSD
  - Infiniband

https://docs.cerit.io

Prostředí Kubernetes

- Postaveno na distribuci RKE2
  - Webové rozhraní Rancher od Suse
- Managed platforma
  - Bez eskalace práv
- Integrace návazných komponent
  - Vydávání certifikátů
  - DNS jména
  - Napojení úložišť
  - Dualstack
  - Integrovaný monitoring a logování
  - Vlastní registry (harbor)

Využití Kubernetes

- Oprávněný uživatel dostane osobní namespace
- Lze získat projekt
  - Více zdrojů
- Lze spouštět docker image “bez omezení”
  - Není možná eskalace práv (su, sudo)

Co běží v Kubernetes?

- Webová rozhraní
  - Jupyterhub
    - Rstudio
  - Alphafold
  - Vzdálený desktop
- VNC vzdálený desktop
- Rancher katalog aplikací (helm balíčky, např. pycharm)
- Výpočty
  - Nextflow, Snakemake
  - Vlastní výpočetní systémy

Jupyterhub

- https://hub.cloud.e-infra.cz https://docs.cerit.io/docs/jupyterhub.html
- Primárně pro Jupyter notebooky
  - Několik připravených obrazů
    - Minimal notebook, Datascience notebook, Tensorflow
  - Obrazy jsou stabilní
  - Možnost připravit vlastní
- Lze pustit navíc Rstudio a Matlab
- Čas běhu není omezený, neaktivní notebooky jsou do týdne ukončeny
- Další instance pro výuku

Alphafold

- https://alphafold.cloud.e-infra.cz https://docs.cerit.io/docs/alphafold.html
- Grafické rozhraní k Alphafold predikci proteinů
- Maximálně zjednodušené bez zadávání skriptů
- Dokončení výpočtu oznámeno mailem
- Výsledky lze orientačně zobrazit přímo v prohlížeči
  - Zároveň jsou ukládány na externí úložiště
- Je integrován mol* webový prohlížeč
  - Při znalosti názvu proteinu lze zobrazit přes mol* vše z EBI databáze

alphafold.cloud.e-infra.cz

AlphaFold$_2$

Compute Alphafold | Compute Colabfold | View Results | Running Jobs | View CIF Protein

Protein name	intricate-burn
Proteins	>Sequence1
Max template date	default
DB Preset	full_dbs
Model Preset	monomer
Precomp MSAS	☐
Predictions per model	5
Run Relax	☑
Make results public	☑
E-mail	xhejtman@ics.muni.cz
Force computation	☐
Version of Alphafold	Alphafold 2.2.0

✔ Run

alphafold.cloud.e-infra.cz

AlphaFold$_2$

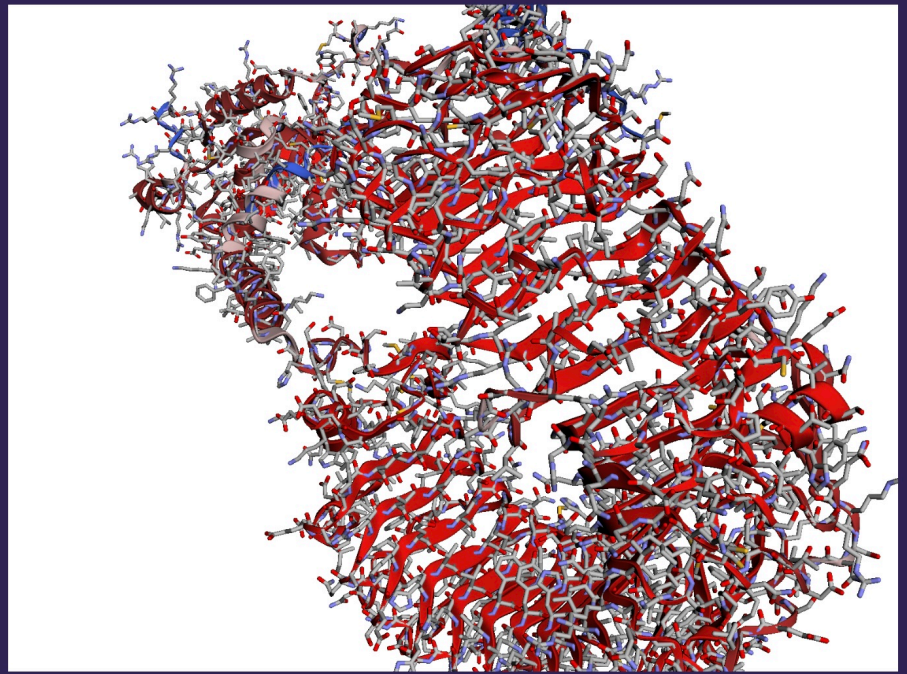
Compute Alphafold | Compute Colabfold | View Results | Running Jobs | View CIF Protein

Computed Results: acchtlr4

- (•) Show all atoms
- ( ) Hide atoms

View Result

Click to open Mol* viewer: OPEN

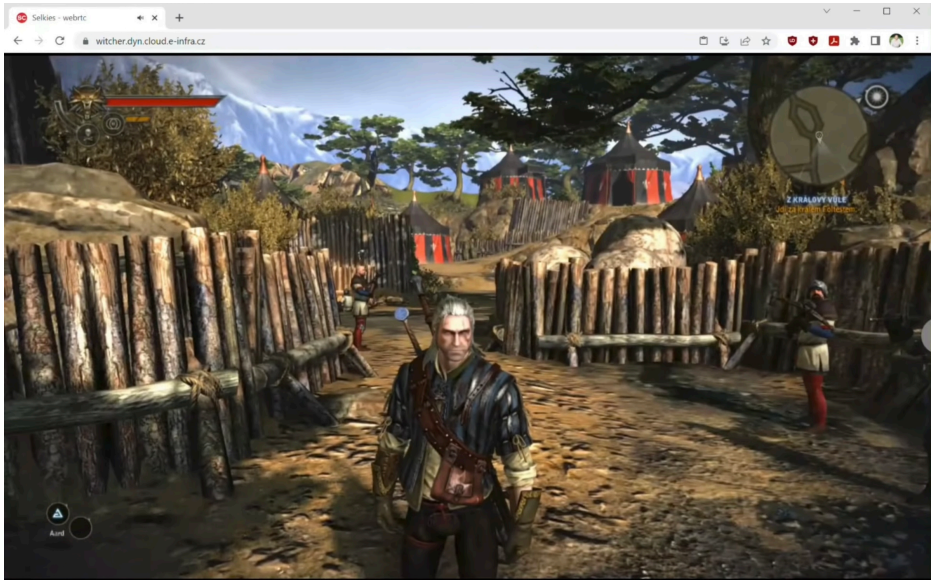


Model Confidence

- Very low (pLDDT < 50)
- Low (70 > pLDDT > 50)
- Confident (90 > pLDDT > 70)
- Very high (pLDDT > 90)

Vzdálené desktopy

- Varianta WebRTC nebo VNC
- WebRTC
  - Plná 3D akcelerace
  - Přístup přes webový prohlížeč
  - Lehce snížená kvalita obrazu
  - Funguje Witcher 2
- VNC
  - Bez 3D akcelerace
  - Nižší latence
  - Nutný VNC klient



Vědecké výpočty

- Řada nástrojů s Kubernetes executorem
- Nextflow, Snakemake
- Velké kontejnery bez microservices
- Výhoda v reprodukovatelnosti běhu
  - Stále stejné prostředí
- Při správném nastavení prakticky nulová režie

Výzkumné problémy

- Sdílení grafických karet
- Plánování zdrojů
  - Lepší využití zdrojů
- Optimalizace výkonu
- Napojení úložišť
- K8sGPT
  - AI pro pomoc se správou infrastruktury, Jarvis?
- Bakalářské, diplomové práce
- Disertace

Děkuji za pozornost