

# EOSC CZ Networking aneb práce s výzkumnými komunitami v oblasti správy dat

Veronika Ambrozová



Spolufinancováno  
Evropskou unií



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

# Motivace

- Implementace EOSC CZ je primárně diskutována v pracovních skupinách (tvořených vědci, OS specialisty, DS,..)
- Hlavní cíl EOSC CZ Networkingu: **prohloubení spolupráce s institucemi**



Architektura národní datové infrastruktury (NDI)



Metadata



Základní služby



Vzdělávání a lidské zdroje



Bio/zdraví/potraviny



Materiálové vědy a technologie



Data management pro umělou inteligenci a strojové učení



Sociální vědy



Fyzikální vědy



Humanitní vědy a umění

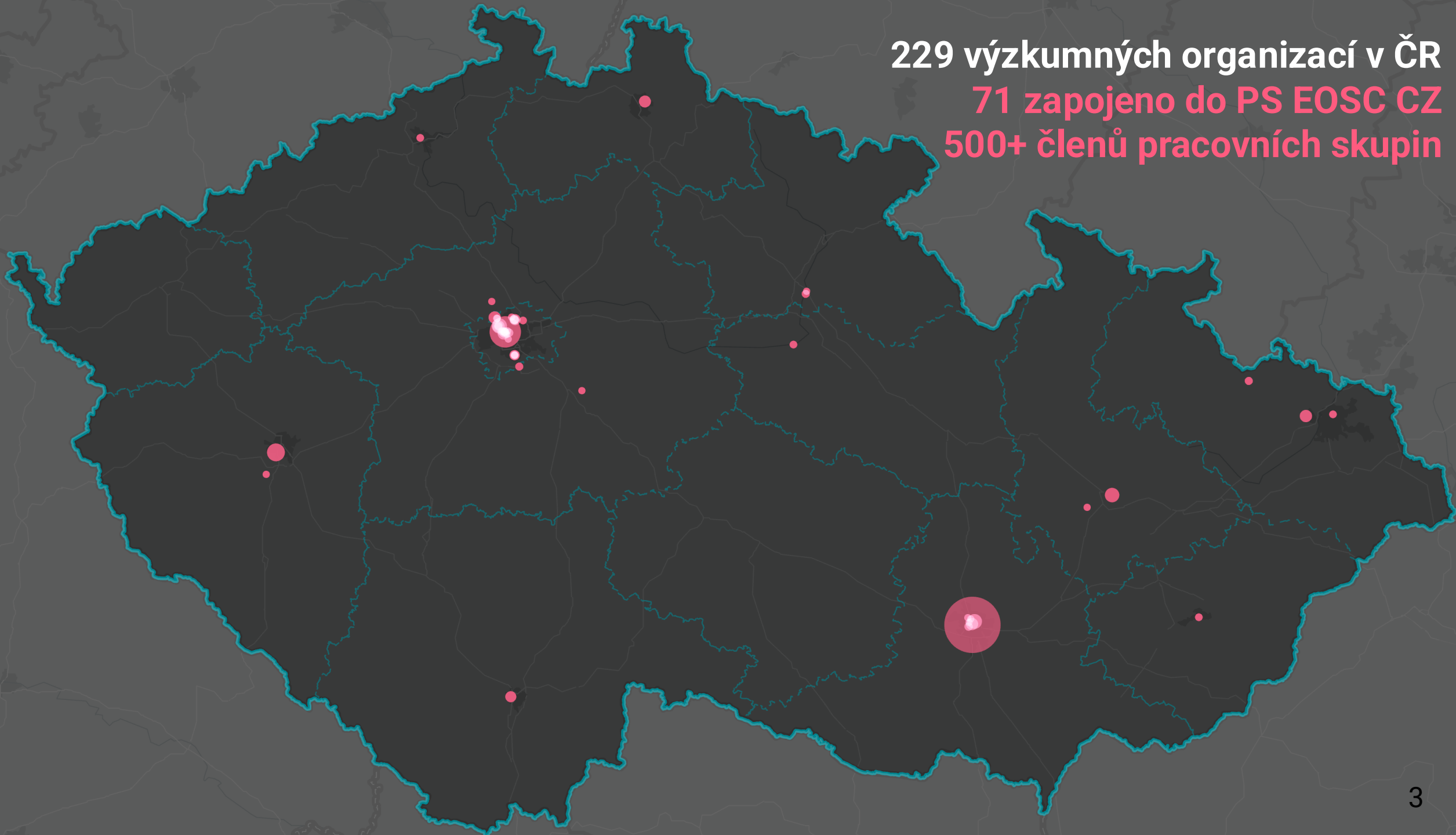


Environmentální vědy



Citlivá data

**229 výzkumných organizací v ČR**  
**71 zapojeno do PS EOSC CZ**  
**500+ členů pracovních skupin**



# EOSC CZ Networking

- Diskuze o implementaci EOSC CZ na institucích
- Budování spolupráce a sdílení zkušeností
- Formát: přednáška + diskuze
- Účastníci: prorektori pro V&V, vědci, OS podpora



Návštěva ÚPOL – 06/2024

# Zapojené instituce



JU – 09/2024



TUL – 10/2024



UTB – 11/2024



AV ČR – 02/2025



UPEC – 03/2025



Brno – 05/2025



UHK – 06/2025

## Další plány:

- FZU AV ČR – 09/2025
- Ostrava – 10/2025
- AZV ČR – 11/2025

# Obsah setkání

- Představení iniciativy EOOSC CZ – výstupy projektů:
  - Budované repozitáře
  - Dostupné služby
  - Výpočetní kapacity
  - Související školení
- Sdílení zkušeností
  - OS aktivity na institucích
  - Role institucionálních a fakultních DS



# Výstupy



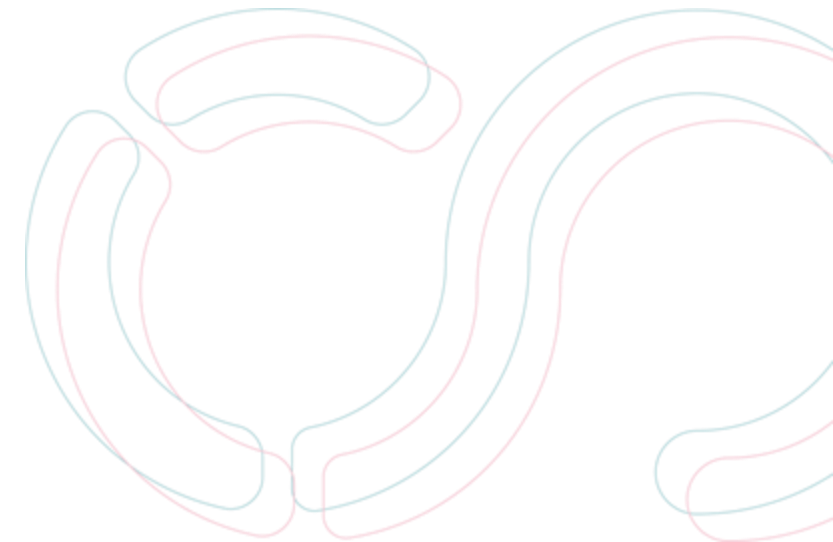
## Institute:

- Materiály a přístup k informacím o dostupných službách
- Možnost diskutovat institucionální OS strategii



## EOSC CZ:

- Rozhovory s vědci a data stewardy
- Jobs sekce na webu



# Tento workshop...

- **Je rozšířená verze EOSC CZ Networkingu**

- Program připravuje domovská instituce
- EOSC CZ dodává řečníky o iniciativě a možnostech pro akademické pracoviště
- Domovská instituce dodává lokální řečníky, co na instituci působí

- **Cílem je:**

- Přiblížit národní EOSC CZ služby a související aktivity s ideou jejich postupného začlenění do běžného chodu univerzity
- Propojit osoby, které na správě FAIR výzkumných dat na univerzitě pracují

# Děkuji za pozornost

[ambrozova@ics.muni.cz](mailto:ambrozova@ics.muni.cz)



Spolufinancováno  
Evropskou unií



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

# Ukázka již existujících e-INFRA CZ služeb: Možnosti využití Metacentra

Jiří Vorel



Spolufinancováno  
Evropskou unií



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

# e-INFRA CZ

- e-infrastruktura pro výzkum a vývoj v ČR
- Poskytuje zdroje pro přenos, ukládání a **zpracování** vědeckých a výzkumných dat

## Gridová infrastruktura MetaCentrum

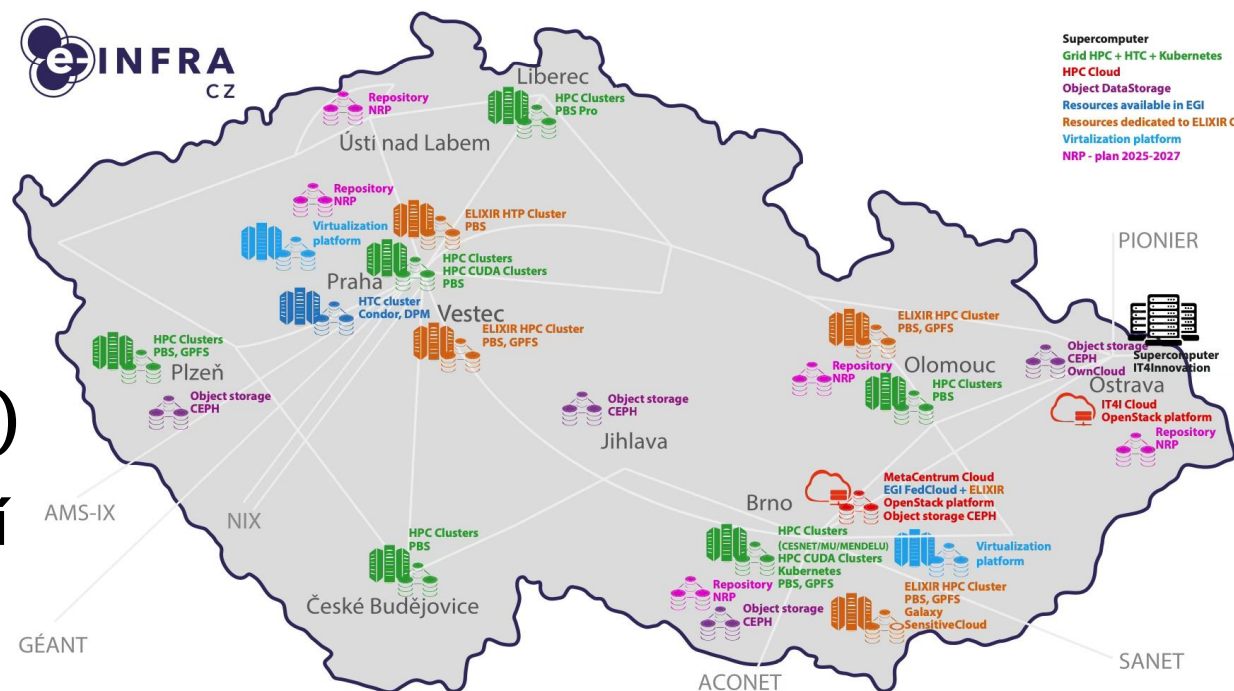


## Národní superpočítačové centrum IT4I



# Výpočetní možnosti e-INFRA CZ – MetaCentrum

- Národní distribuované výpočetní prostředí
- Zdroje poskytuje CESNET + CERIT-SC (ÚVT MUNI) + ústavy AV ČR + univerzity
- Poskytování HW zdrojů a aplikačního SW (free/obecné licence/soukromé licence)
- Více způsobů použití (CLI, GUI, cloud )
- **Využití zdarma, registrace kdykoliv okamžitý přístup (grantové žádosti v IT4I)**
- **Školení i pro menší skupinky na požádání**



[www.metacentrum.cz](http://www.metacentrum.cz)   [docs.metacentrum.cz](http://docs.metacentrum.cz)



### INTERACTIVE APPLICATIONS

#### INTERACTIVE APPLICATIONS

- Matlab
- Gromacs
- AlphaFold
- CLCbio
- RStudio
- Ansys ...

Konkrétní aplikace ovládaná uživatelem interaktivně a v grafickém (web-based) prostředí.



### PLATFORMS

#### PLATFORMS

- Jupyter Notebooks (OpenPBS, K8s)
- Galaxy (OpenPBS)
- OnDemand (OpenPBS)

Okamžitě dostupná web-based služba/platforma umožňující spustit požadované aplikace.



openstack.

### INFRASTRUCTURE

#### INFRASTRUCTURE

- OpenPBS for HPC
- Kubernetes (K8s) / Rancher
- OpenStack Cloud / Sensitive Cloud

Výpočetní infrastruktura řídící přidělování HW a SW jednotlivým uživatelským úlohám.



### HARDWARE

#### HARDWARE

- MetaCentrum: 47 tis. CPUs, 462 GPUs
- IT4I SuperComputers: 30 tis. CPUs, 16,7 PFlops

Fyzický HW (GPU, CPU, RAM, disková pole) rozdělovaný mezi jednotlivé uživatelské úlohy.

[illegible]

SSH přístup skrze příkazovou řádku (CLI), nebo SSH klienta.

Možnost nahrávat/stahovat data  
do/z NRP, S3.

```
(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ module add orca/6.0.1
Loading orca/6.0.1
Loading requirement: libiconv/1.16-gcc-10.2.1-jbvbjy
zlib/1.2.12-gcc-10.2.1-7qmmk4c libxml2/2.9.13-gcc-
libpciaccess/0.16-gcc-10.2.1-f4q3srx ncurses/6.2-g
libevent/2.1.12-gcc-10.2.1-dqblgi5 numactl/2.0.14-
openjdk/11.0.14.1_1-gcc-10.2.1-2ll77ke pmix/4.1.2-
libnl/3.3.0-gcc-10.2.1-0a4lipo rdma-core/39.1-gcc-
openmpi/4.1.3-intel-2021.6.0-4vqcbbe
(BOOKWORM)vorel@nympha:~$ orca --help
```

```
*****
* O R C A *
*****
```

```
#,
###
####
#####
#####
#####
,#####
,#####
,#####
```

Aplikace Open OnDemand v  
prohlížeči pro grafické aplikace.

<https://ondemand.grid.cesnet.cz/>

```
.,#,' #, ## ## ,#,' #, #' #
## ## ## ,#,' ## #' #' #'
## ## ##### ## ,#####, #####, # #
', #,' ## ## ', #,' #, #, # #, #
'#####' ## ## '#####' #' #' '#####' # '#####'
```

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

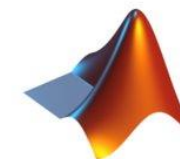
## Selected applications - all apps



Jupyter Lab/Notebook



RStudio

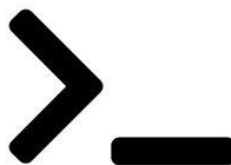


Matlab



FLUENT

Ansys Fluent



Frontend shell



Meta Desktop



Job Composer



BIOP Desktop

## Announcements

usegalaxy.cz

# Galaxy

Tools

Upload Data  
Get Data  
External Data  
Send Data  
Collection Operations

**GENERAL TEXT TOOLS**

Text Manipulation  
Filter and Sort  
Join, Subtract and Group  
Convert Formats

**GENOMIC FILE MANIPULATION**

FASTA/FASTQ  
Quality Control  
SAM/BAM  
BED  
VCF/BCF  
Nanopore

## useGalaxy.cz

Welcome to the Czech Galaxy instance of E-Infra CZ and ELIXIR CZ hosted at MetaCentrum. We aim to enable accessible, reproducible, and transparent computational research in Czechia. We support thousands of documented and maintained tools that are free to use and backed by a robust public infrastructure.

Please visit our [Documentation](#) for details about using this service. In case of any further questions, please contact us at [galaxy@cesnet.cz](mailto:galaxy@cesnet.cz).

Have a look at one of our [trainings](#) or you can start with an interactive tour:

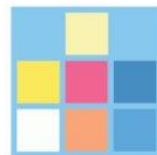
Galaxy UI Galaxy History Window Manager Deferred Datasets

<https://usegalaxy.cz>

**Ansys**

FLUENT

Ansys Fluent



Webová aplikace pro zpracování bio\* dat, statistiku, ekologii, chemii, LLM atd. Sdílení workflow, reprodukovatelnost. Plánována podpora nahrávání dat na NRP.

Galaxy

Upload

Tools

Workflows

Workflow Invocations

Visualization

KA

KH

NMA

Cluster

Workloads

Apps

Charts

Installed Apps

Repositories

Recent Operations

Service Discovery

Storage

Monitoring

Alerting

Logging

Tracing

Backup

Restore

Export

Import

Help

rancher.cloud.e-infra.cz

Only User Namespaces

Charts

cerit-sc

All Categories

Show deprecated apps

ansys

ANSYS 2021R1

Linux only

bibs

Linux only

blender

Blender

Linux only

cplex

IBM ILOG CPLEX Studio

Linux only

desktop

Remote Desktop

Linux only

knime

Knime over VNC

Linux only

matlab

Matlab 9.11

Linux only

maxquant

MaxQuant

Linux only

minio

Minio personal server

Linux only

Aplikace  
Rancher na  
spouštění  
Docker obrazů.

[docs.cerit.io](https://docs.cerit.io)



## New Job

AlphaFold 3

Run job

AlphaFold 2

Run job

ColabFold

Run job

OmegaFold

Run job

ESMFold

Run job

## Last Computed Jobs

My Jobs Public Jobs

Search jobs... 

| Shared | Name | Service | Start | Result |
|--------|------|---------|-------|--------|
|--------|------|---------|-------|--------|

Webová aplikace Foldify pro predikci 3D struktur proteinů nástrojem AlphaFold.

<https://foldify.cloud.e-infra.cz/>

# Děkuji za pozornost

vorel@cesnet.cz



Spolufinancováno  
Evropskou unií



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY