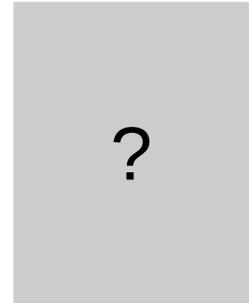


HPC an Thüringer Hochschulen

HPC-Gruppe

- **Henning Schwanbeck (TU Ilmenau)**
www.tu-ilmenau.de/hpc
- **André Sternbeck (FSU Jena)**
www.uni-jena.de/urz
- **Simon Marwitz (BU Weimar)**
www.uni-weimar.de/ism

hpc@hs-itz.de



Zentrale Aufgaben

- **Versorgung mit HPC-Technologien für alle Thüringer Hochschulen**
 - Bedarfsorientierter Ausbau der HPC-Infrastruktur
 - Management und Dokumentation der HPC-Systeme
 - Bereitstellung aktueller wissenschaftlicher Software
- **Beratung von WissenschaftlerInnen mit HPC-Bezug**
 - Ticketsystem / E-Mail / Chat / ...
 - Beratung lokaler Nutzer
- **Training von NachwuchswissenschaftlerInnen (Workshops)**
 - Regelmäßige Workshops zu HPC-Themen

Überblick

- **FSU Jena**
 - HPC-Cluster (“Ara” und “Draco”)
 - Aufbau und Tests von “ScienceCloud“-Angeboten
- **TU-Ilmenau**
 - **Massiv Paralleler ComputeCluster** 4. Generation
 - GPU-Cluster 2021

Forschungsstandort Jena

- **Friedrich-Schiller-Universität**

- Größte Hochschule in Thüringen
(ca. 18.000 Studierende, 8600 Mitarbeiter)
- Diverse internationale Forschungsgruppen
- Einige mit starken numerischen Bezug

z.B.  **MichaelStifelCenterJena**
for Data-Driven and Simulation Science

- Steter Bedarf an lokalen Ressourcen für Hochleistungsrechnen

- **Enge Kooperation mit außeruniversitären Instituten**

- DLR Jena, Helmholtz-Institut Jena, Leibniz Institute of Photonic Technology (IPHT),
Leibniz-Institut für Naturstoff-Forschung und Infektionsbiologie (Hans-Knöll-Institut), ...





HPC-Cluster an der FSU Jena

- **HPC-Cluster „Ara“** (eines der „7 Wunder von Jena“)
 - Für rechenintensive Projekte
 - Größter HPC-Clusters Thüringens
 - Beschränkter Nutzerkreis (beteiligte Forschungsgruppen)
 - Betreuung und Beratung durch URZ
- **HPC-Cluster „Draco“** (weiteres der „7 Wunder von Jena“)
 - Im Aufbau / in Erweiterung
 - Allgemein zugänglich für Projektes aus Lehre und Forschung
 - Erweiterung durch HS-ITZ → Thüringenweite Nutzung angedacht
 - Betreuung und Beratung durch URZ
- **DLR-Cluster „Kratos“** (“Housing”, exklusiv für DLR Institute)

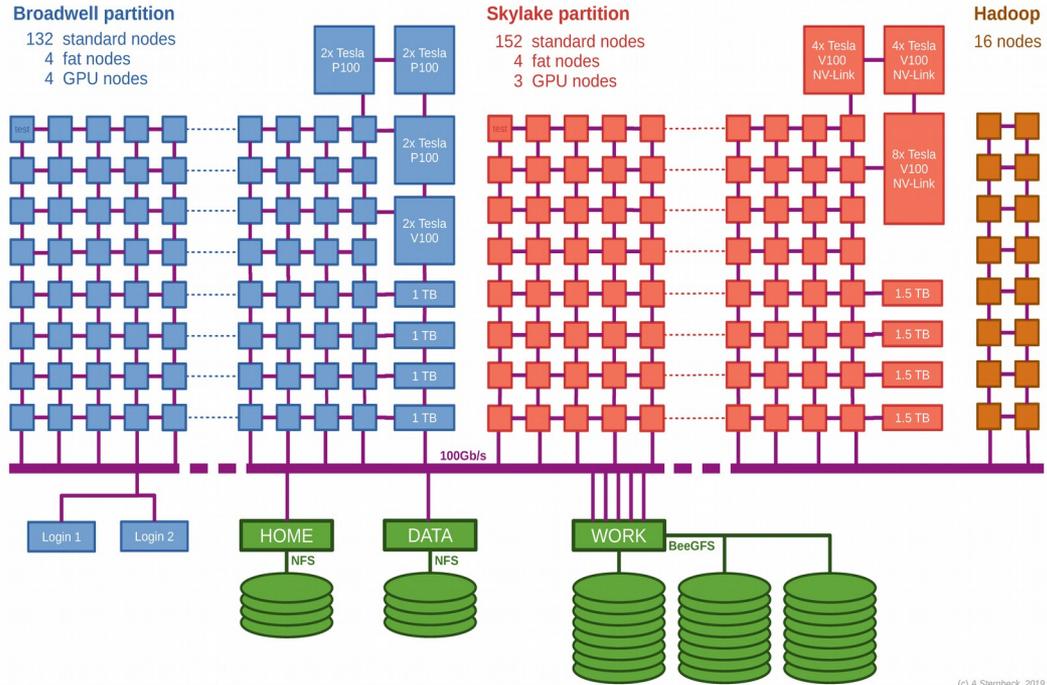


„Ara“ für rechenintensive Projekte

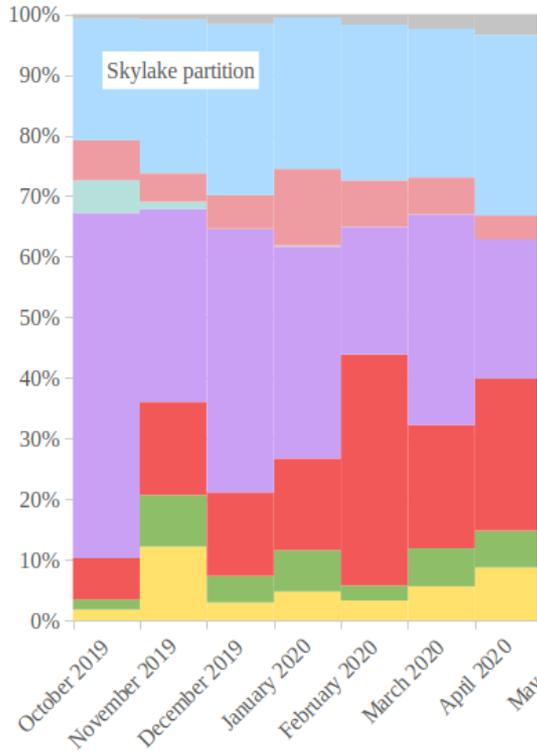
- **297 Standard-Rechenknoten + 2 Loginknoten**
 - 129 Knoten: jeweils 24 CPU-Kerne + 128 GB RAM
 - 168 Knoten: jeweils 36 CPU-Kerne + 192 GB RAM
- **10 GPU-Knoten** (NVIDIA P100, V100 und A100)
- **7 FAT-Rechenknoten**
 - 3 Knoten: jeweils 24 CPU-Kerne und 1 TB RAM
 - 4 Knoten: jeweils 64 CPU-Kerne und 1.5 TB RAM
- **3 Speichersysteme**
 - HOME 80 TB (NFS)
 - WORK 524 TB (BeeGFS)
 - DATA 80 TB + 160 TB (NFS)



„Ara“ für rechenintensive Projekte



(c) A. Sternbeck, 2019



„Ara“ für rechenintensive Projekte

- **Nutzerkreis**

- Eingeschränkter Nutzerkreis (ca. 15 Arbeitsgruppen)
- Finanziert über DFG-Großgeräte-Anträge 2016 + 218
- Forschungsgruppen aus (Bio-)Informatik, Chemie und Physik
- Hauptnutzer: 3-6 Gruppen aus Physik + Chemie

- **Nutzung**

- 70-90% aller CPU-Kerne stets belegt (90-95% aller Knoten)

- **„Ara2“**

- Erneuerungs-/ Erweiterungsantrag angedacht für 2022 in Planung

Zusätzlicher HPC-Standort am Campus Beutenberg

- **Racksystem (Rittal Matrix)**
 - Installation März 2021
 - 4 IT-Racks + Kühlung (intern)
 - Platz für weitere 6 IT-Racks in zweiter Rackreihe möglich
- **HPC-Cluster „Draco“**
 - Inbetriebnahme des Basissystems im April/Mai 2021
 - Ausbau durch Thüringer HS-ITZ 2021/22
 - aktuelle Ausschreibung ca. 1 MEUR

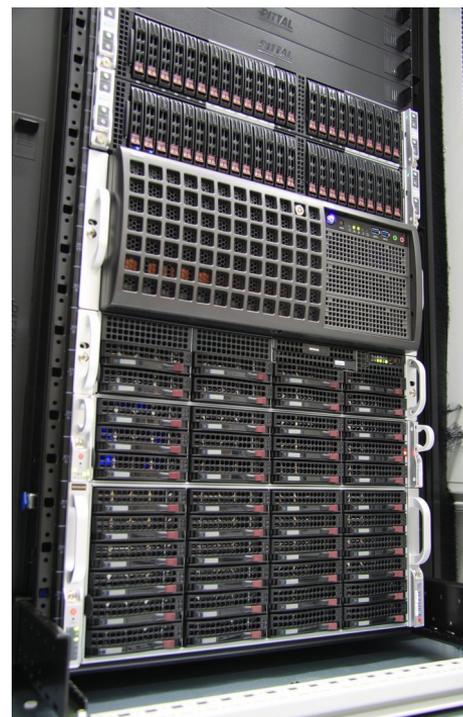


HPC-Cluster "Draco" allgemein verfügbar



- **Basissystem** (Stand 6/2021)

- 8 Standard-Rechenknoten
je 48 Intel-Kerne, 384 GB RAM
- Remote-Workstation
je 40 Intel-Kerne, 768 GB RAM, GPU
- BeeGFS-Dateisystem (~66 TB)
- 4-GPU-Server (Profillinie „Light“)
128 AMD-Kerne, 4x A100 GPUs
- 4 CPU-GPU-Server (HI Jena)
128 AMD-Kerne, 4x V100 GPUs
- Daten-Server (Fernerkundung)
- AlmaLinux 8.3



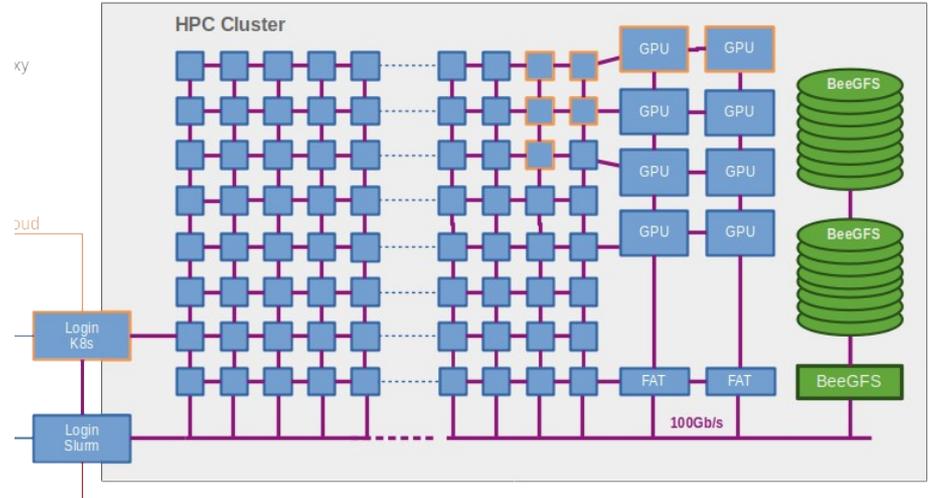
Erweiterung

- **Zusätzliche Hardware**

- + 60-80 Standard-Rechenknoten
- + 2 High-Memory-Knoten
- + 2 GPU-Knoten
- + 2 Visualisation-Server
- + 2 Login-Server
- + BeeGFS-Dateisystem mit 500 TB

- **Software**

- Aktueller Scientific Software Stack (Nutzer fragen, wir installieren soweit möglich)
- Webbrowser-basiertes “Cloud-Computing” (JupyterHUB, Rstudio, Remote Workstations, Kubernetes-Cluster, ...)



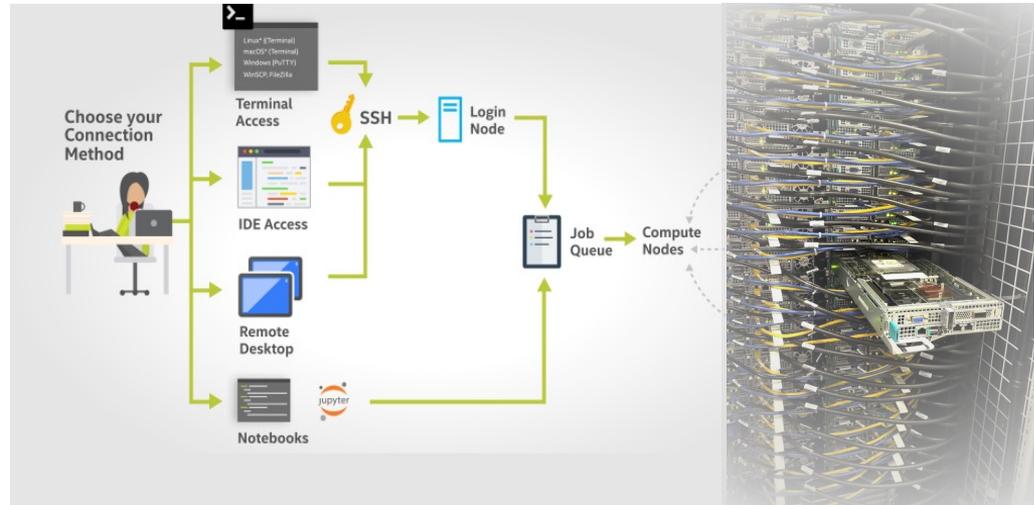
Vielfältige Nutzung von HPC-Ressourcen

- **Traditionelles Nutzerprofil**

- größere Ressourcen pro Nutzer
(viele Kerne, viele Knoten)

- **Nutzerprofil (Trend)**

- viele Nutzer, aber weniger Ressourcen pro Nutzer, oft Python (z.B. 1 GPU, 1 Knoten)
- Nutzer nicht mehr nur aus naturwissenschaftl. Bereichen
- Mehr interaktive Angebote
→ Nutzung von HPC-Ressourcen über Webbrowser oder VDI-Klienten (“Remote Desktop”)



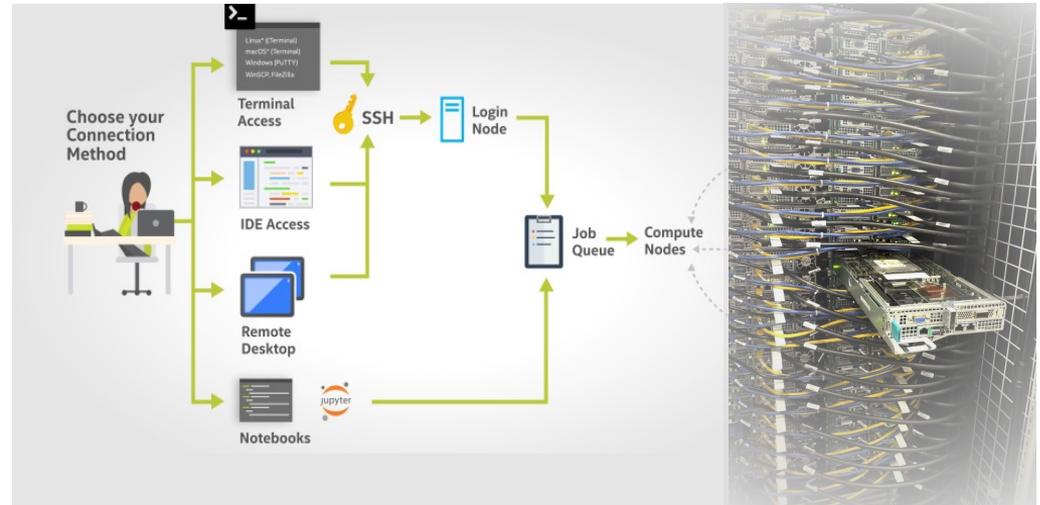
Vielfältige Nutzung von HPC-Ressourcen (“ScienceCloud”)

- “ScienceCloud” umfasst

- 1) Klassischer SSH-Zugang zu HPC-Cluster
- 2) Zusätzliche Web-Schnittstellen für wissenschaftliche Software
 - Jupyterhub, Rstudio, ...
 - Kubernetes-Cluster (dediziert reservierte Knoten)

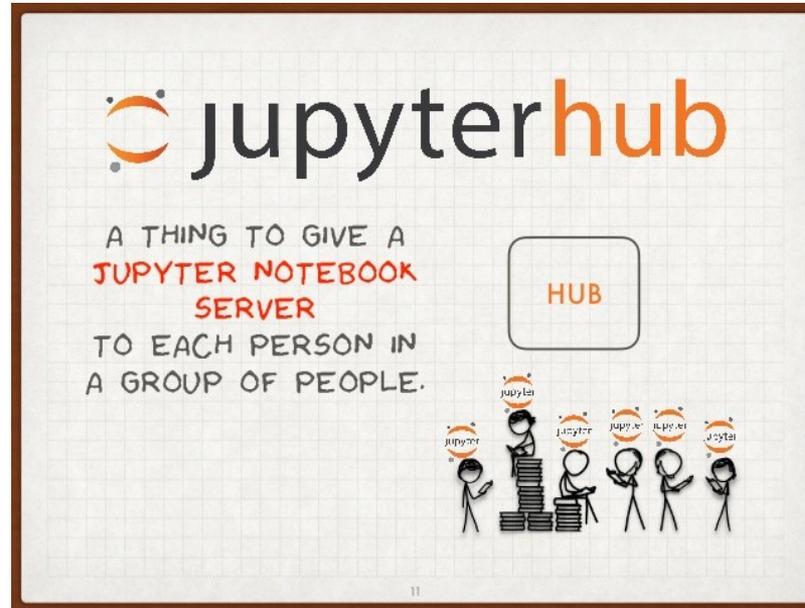
- Basis

- HPC-Cluster mit Knoten für dedizierte Aufgaben
- Pilotprojekt derzeit auf älterer Hardware, dann auf erweitertem HPC-Cluster „Draco“



1) Jupyterhub Ressourcen im Webbrowser nutzen

- **Zielgruppe**
 - Lehrbetrieb & Schulungen
 - Studierende / Doktoranden
- **Interaktives Arbeiten**
 - Python, R, Julia, ...
- **Basis** („Beta-Dienst“)
 - Kubernetes-Cluster aus HPC-Knoten im URZ



1) Jupyterhub Ressourcen im Webbrowser nutzen

- **Zielgruppe**

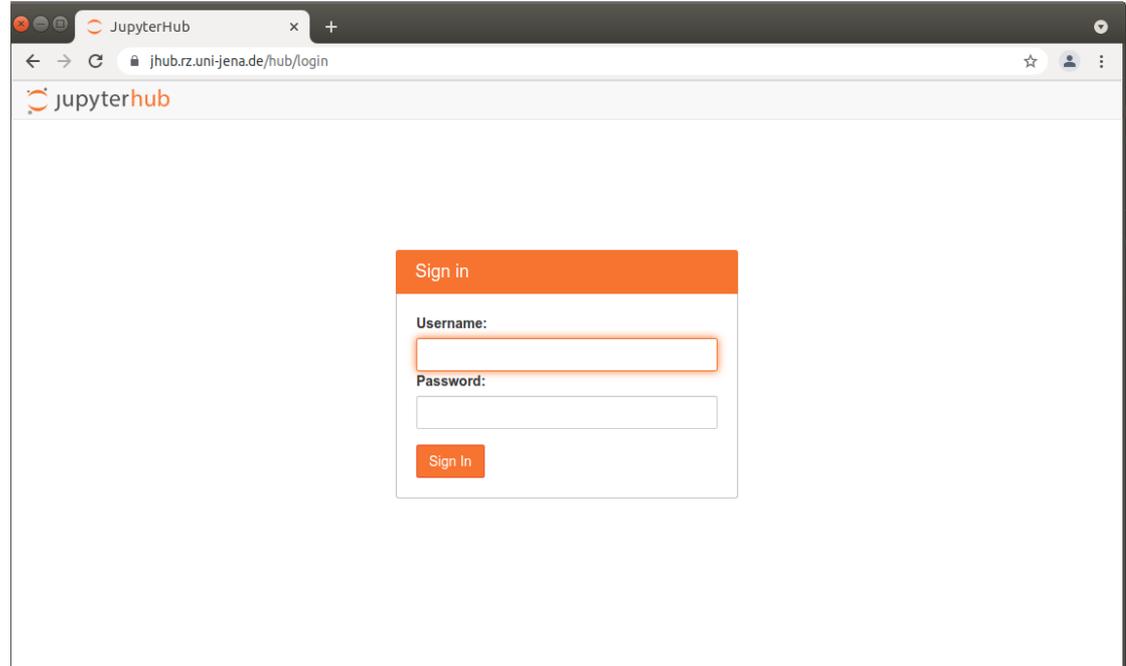
- Lehrbetrieb & Schulungen
- Studierende / Doktoranden

- **Interaktives Arbeiten**

- Python, R, Julia, ...

- **Basis** („Beta-Dienst“)

- Kubernetes-Cluster
aus HPC-Knoten im URZ



jhub.rz.uni-jena.de, jup.rz.tu-ilmenau.de

1) Jupyterhub Ressourcen im Webbrowser nutzen

- **Zielgruppe**

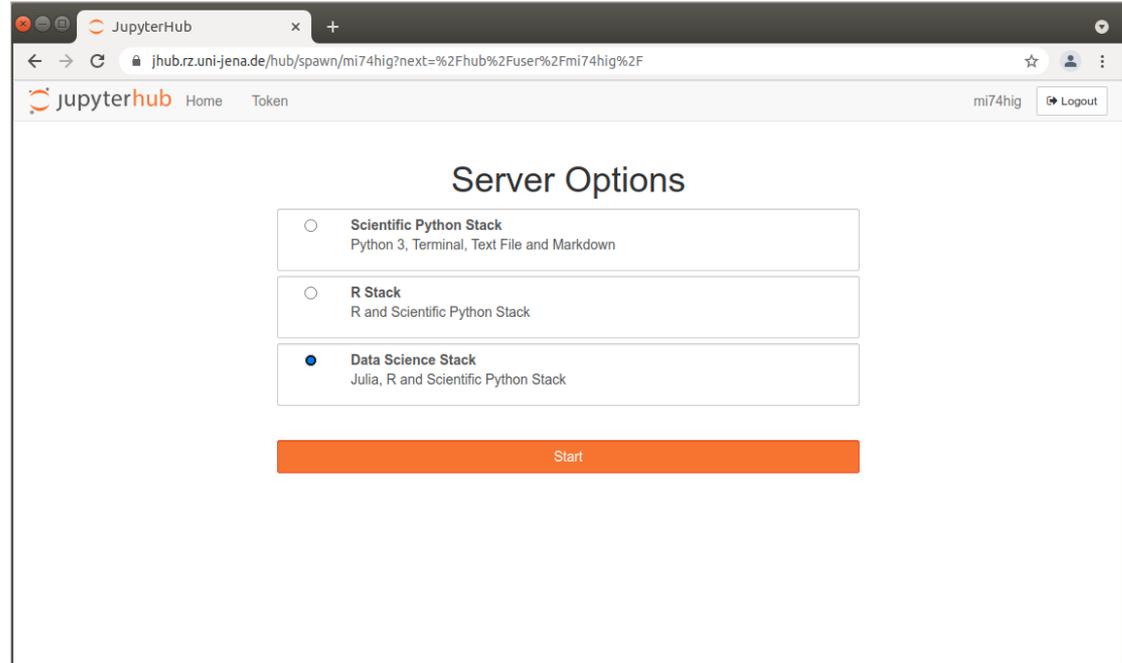
- Lehrbetrieb & Schulungen
- Studierende / Doktoranden

- **Interaktives Arbeiten**

- Python, R, Julia, ...

- **Basis** („Beta-Dienst“)

- Kubernetes-Cluster
aus HPC-Knoten im URZ



jhub.rz.uni-jena.de, jup.rz.tu-ilmenau.de

1) Jupyterhub Ressourcen im Webbrowser nutzen

- **Zielgruppe**

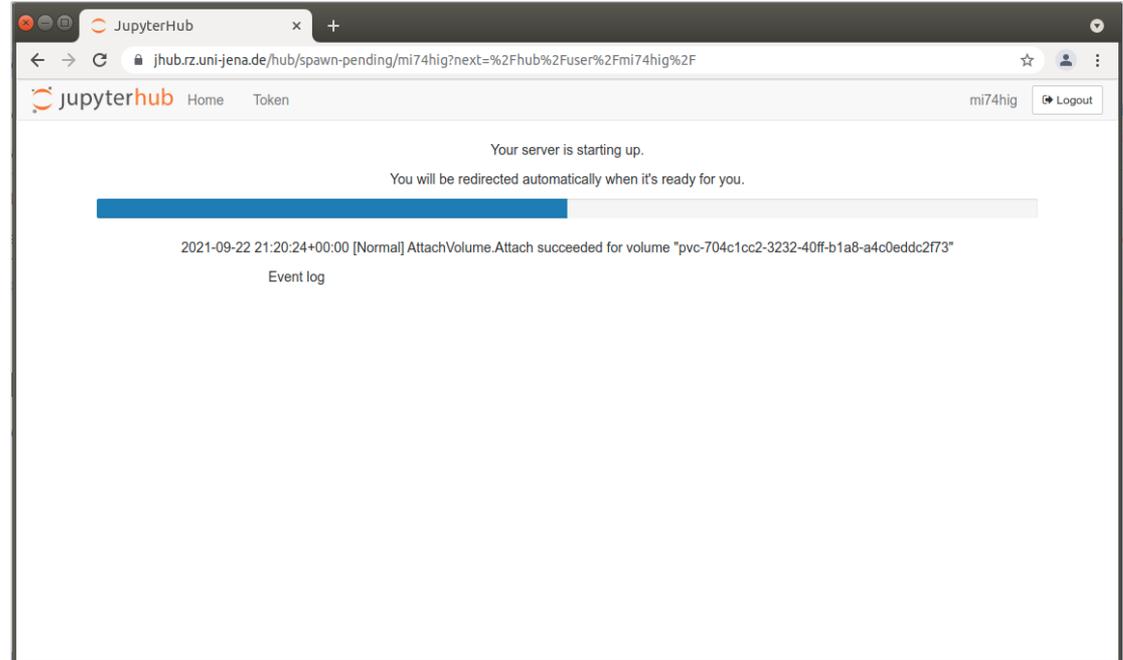
- Lehrbetrieb & Schulungen
- Studierende / Doktoranden

- **Interaktives Arbeiten**

- Python, R, Julia, ...

- **Basis** („Beta-Dienst“)

- Kubernetes-Cluster
aus HPC-Knoten im URZ



jhub.rz.uni-jena.de, jup.rz.tu-ilmenau.de

1) Jupyterhub Ressourcen im Webbrowser nutzen

- **Zielgruppe**

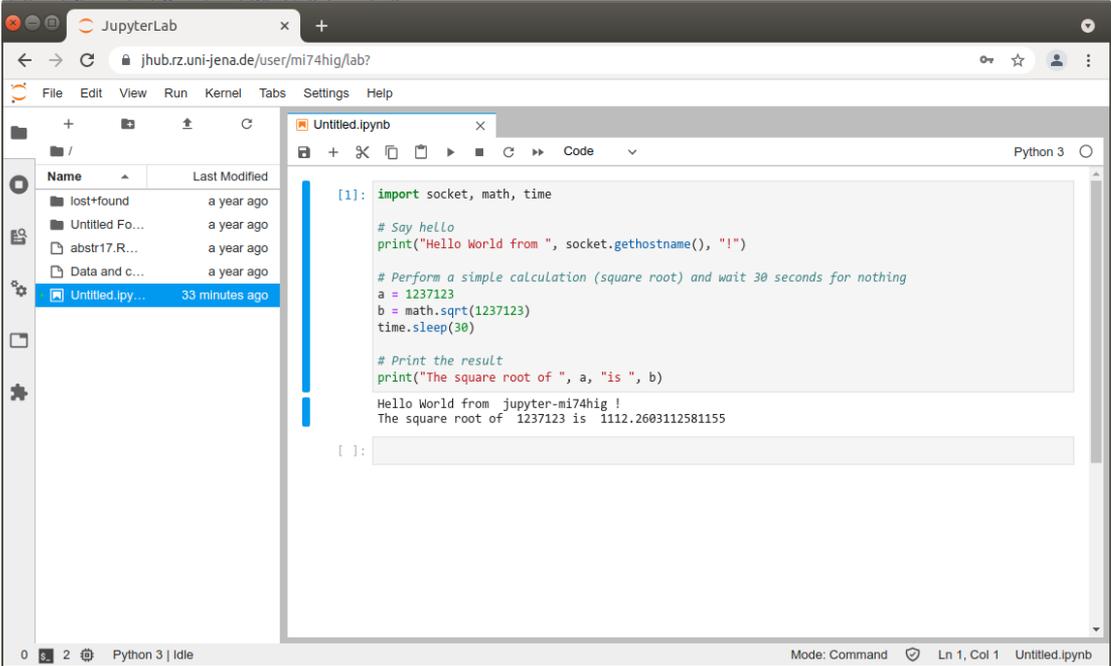
- Lehrbetrieb & Schulungen
- Studierende / Doktoranden

- **Interaktives Arbeiten**

- Python, R, Julia, ...

- **Basis** („Beta-Dienst“)

- Kubernetes-Cluster
aus HPC-Knoten im URZ



```
[1]: import socket, math, time

# Say hello
print("Hello World from ", socket.gethostname(), "!")

# Perform a simple calculation (square root) and wait 30 seconds for nothing
a = 1237123
b = math.sqrt(1237123)
time.sleep(30)

# Print the result
print("The square root of ", a, "is ", b)

Hello World from jupyter-mi74hig !
The square root of 1237123 is 1112.2603112581155

[ ]:
```

jhub.rz.uni-jena.de, jup.rz.tu-ilmenau.de

2) Rstudio-Server Statistische Analysen im Webbrowser

- **Zielgruppe**

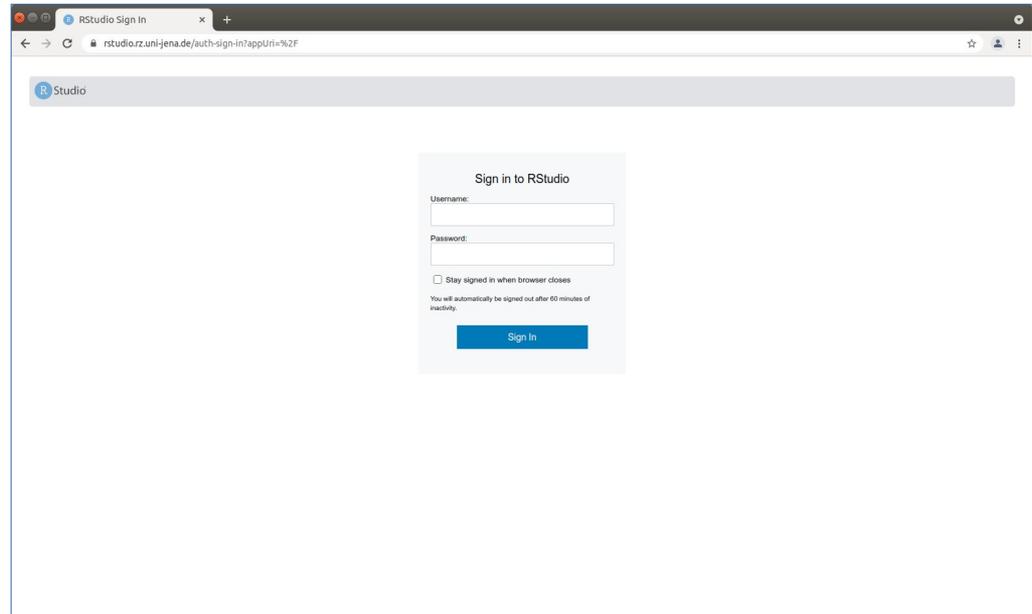
- Lehrbetrieb & Schulungen
- Studierende / Doktoranden

- **Interaktives Arbeiten**

- R, Rscript

- „Beta-Dienst“ im Aufbau

- Workstation
- Später Umzug auf Kubernetes



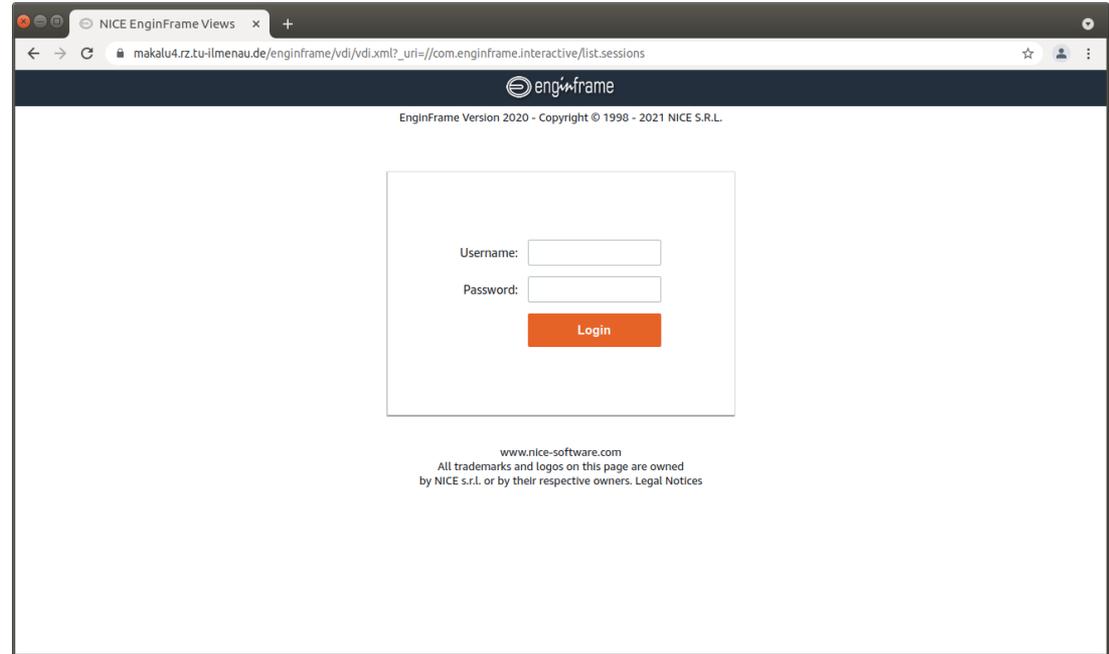
3) Remote Workstation

- **Software**

- NiveDCV (Amazon)
- Client und Webbrowser
- EnginFrame (Portal)

- **Hardware**

- Dedizierte Visualisierungsserver
- NVIDIA Quadro Grafik



Fast fertig ... Beispiel von TU-Ilmenau: www.tu-illmenau.de/vis

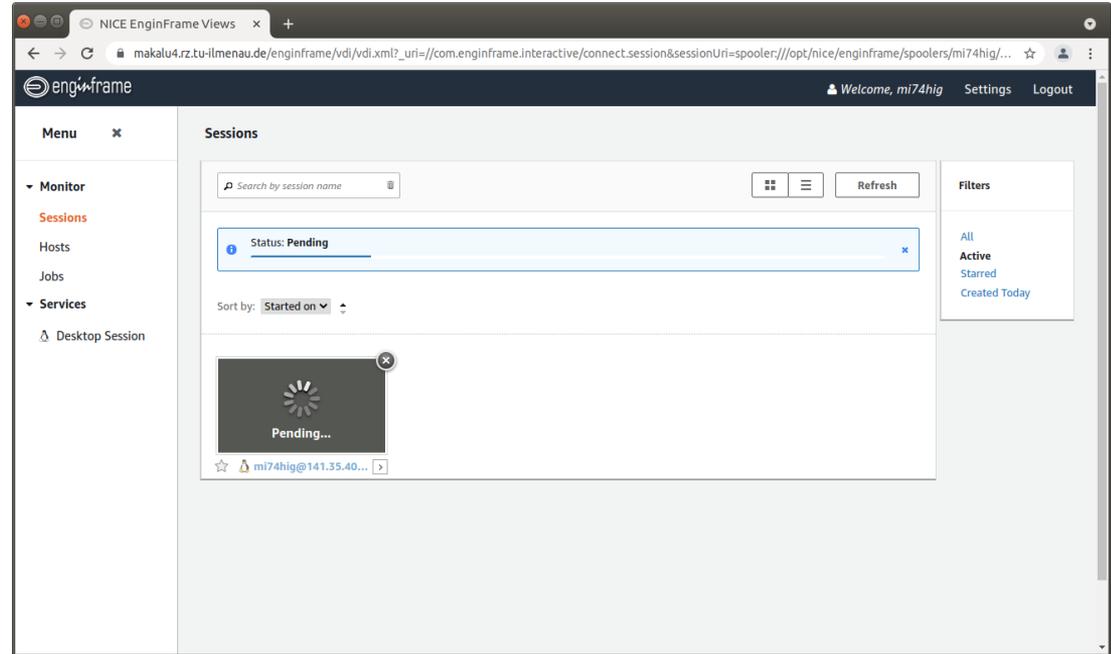
3) Remote Workstation

- **Software**

- NiveDCV (Amazon)
- Client und Webbrowser
- EnginFrame (Portal)

- **Hardware**

- Dedizierte Visualisierungsserver
- NVIDIA Quadro Grafik



Fast fertig ... Beispiel von TU-Ilmenau: www.tu-illmenau.de/vis

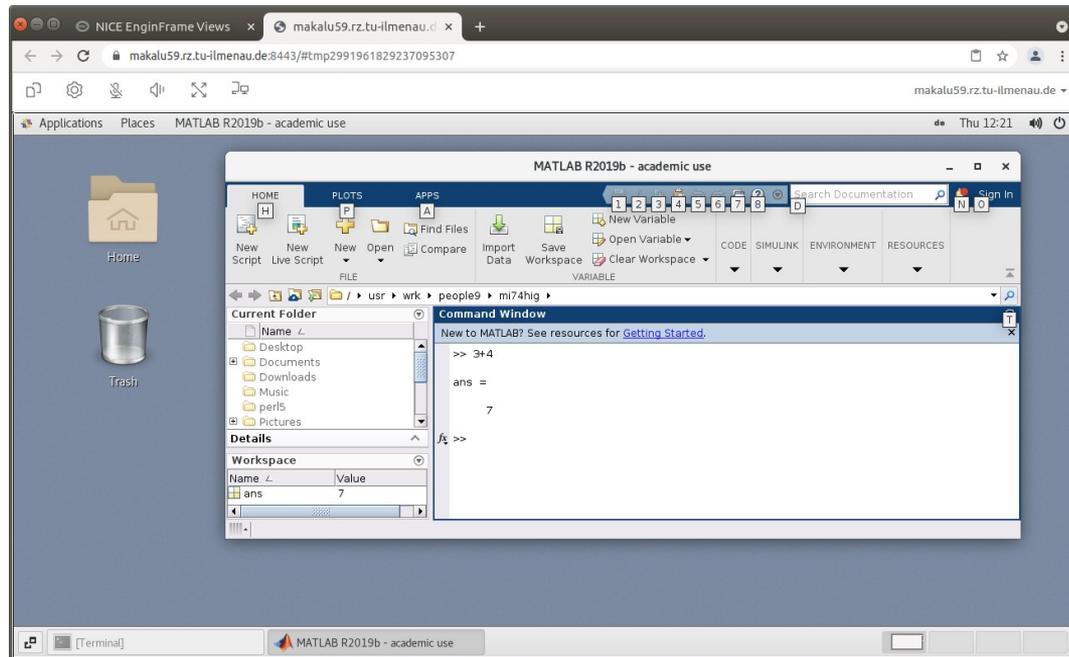
3) Remote Workstation

- **Software**

- NiveDCV (Amazon)
- Client und Webbrowser
- EnginFrame (Portal)

- **Hardware**

- Dedizierte Visualisierungsserver
- NVIDIA Quadro Grafik

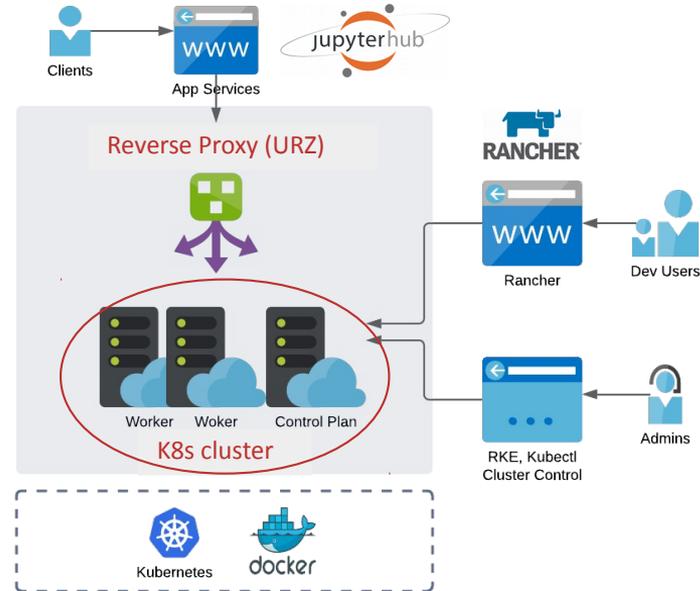


Fast fertig ... Beispiel von TU-Ilmenau: www.tu-illmenau.de/vis

4) Kubernetes für wissenschaftliche Projekte



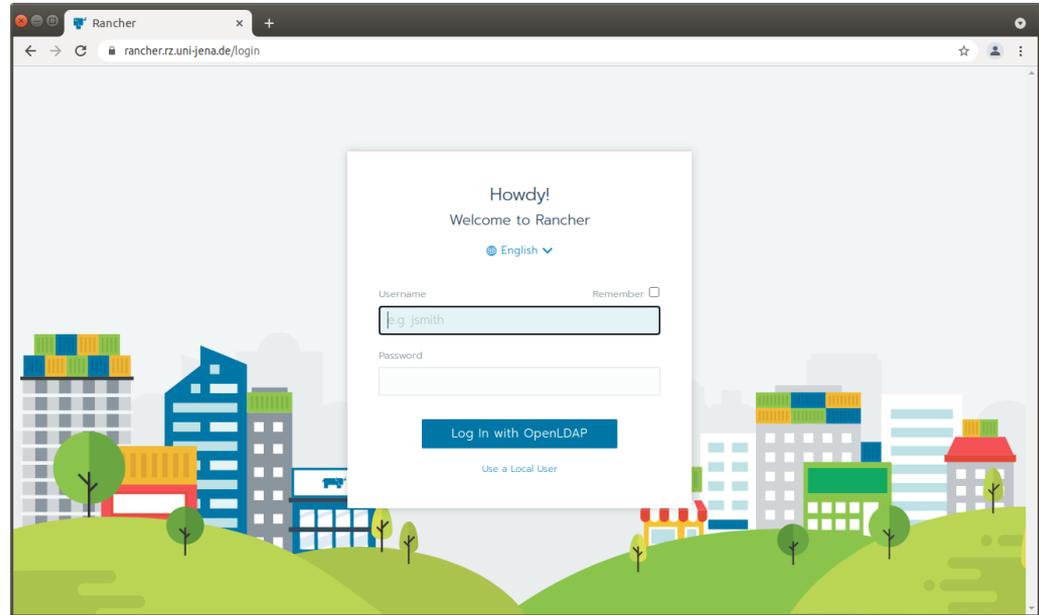
- **Rancher-Portal** („Beta-Dienst“)
 - Administration von eigenen Kubernetes-Clustern
 - Interessant für Projekte mit Software-Containern („Science on Kubernetes“)
- **Voraussetzung:**
 - Linux-Workstations oder VMs mit Docker („Rancher-Client“ im Container)
 - Verwaltung + Software über Rancher-Portal



4) Kubernetes für wissenschaftliche Projekte



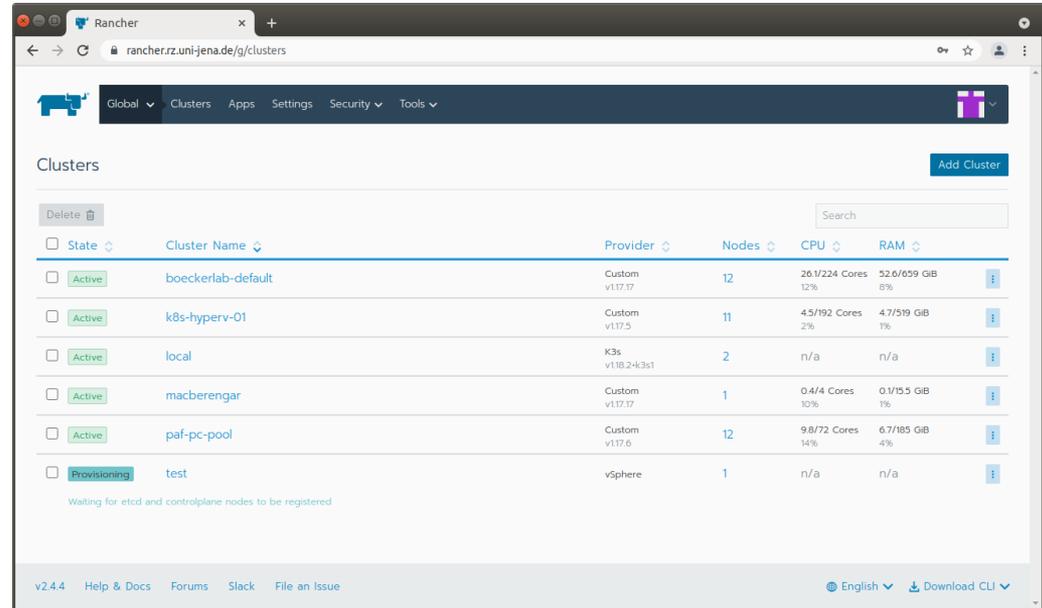
- **Rancher-Portal** („Beta-Dienst“)
 - Administration von eigenen Kubernetes-Clustern
 - Interessant für Projekte mit Software-Containern („Science on Kubernetes“)
- **Voraussetzung:**
 - Linux-Workstations oder VMs mit Docker („Rancher-Client“ im Container)
 - Verwaltung + Software über Rancher-Portal



4) Kubernetes für wissenschaftliche Projekte



- **Rancher-Portal** („Beta-Dienst“)
 - Administration von eigenen Kubernetes-Clustern
 - Interessant für Projekte mit Software-Containern („Science on Kubernetes“)
- **Voraussetzung:**
 - Linux-Workstations oder VMs mit Docker („Rancher-Client“ im Container)
 - Verwaltung + Software über Rancher-Portal

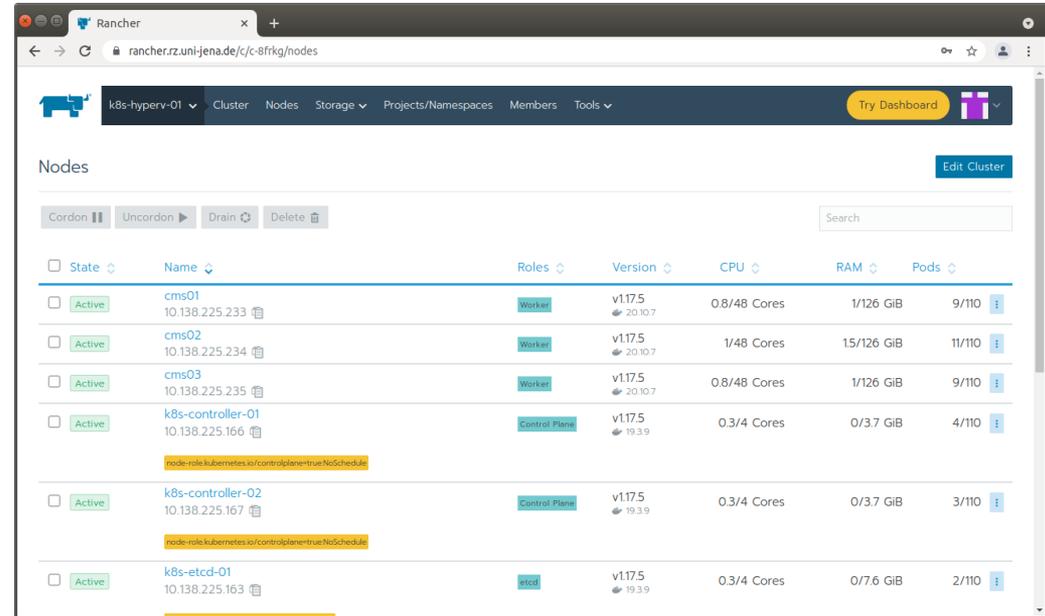


Erste Nutzer aus Informatik und Physik!

4) Kubernetes für wissenschaftliche Projekte



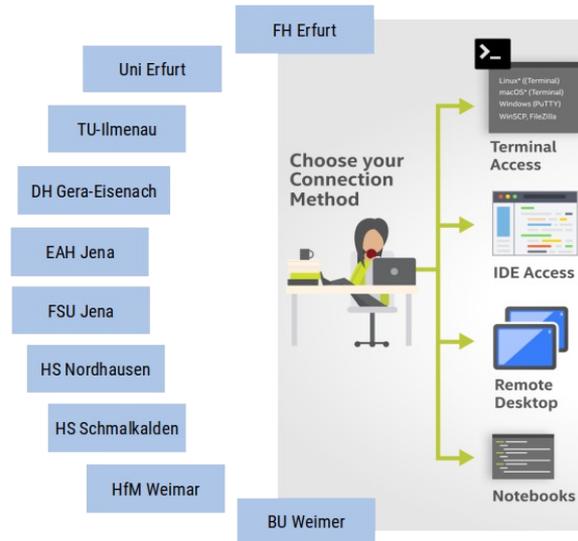
- **Rancher-Portal** („Beta-Dienst“)
 - Administration von eigenen Kubernetes-Clustern
 - Interessant für Projekte mit Software-Containern („Science on Kubernetes“)
- **Voraussetzung:**
 - Linux-Workstations oder VMs mit Docker („Rancher-Client“ im Container)
 - Verwaltung + Software über Rancher-Portal



Erste Nutzer aus Informatik und Physik!

Ziel: Bereitstellung von HPC-Ressourcen an TU-Ilmenau und FSU-Jena

Gemeinsame Nutzung
aller thüringer Ressourcen
(teilweise bereits jetzt möglich)



Die TU Ilmenau in Zahlen

- **5500 Studenten**
- **1000 Mitarbeiter**
- **100 Professoren**
- **fünf Fakultäten:**
 - Maschinenbau
 - Elektrotechnik/Informationstechnik
 - Mathematik und Naturwissenschaften
 - Informatik und Automatisierung
 - Wirtschaftswissenschaften und Medien
- **Budget: ca. 80 Mio Land / > 40 Mio Drittmittel**



Das UniRZ in Zahlen

- **Virt. Infrastruktur 50 Servern**
 - 700 virtuelle Server
 - 600 virtuelle Desktops
- **Backupinfrastruktur**
 - 2 Standorte, 4..8 PB Kapazität, 80% belegt
- **Campus Ehrenberg + Campus Stadt**
 - (+Fischerhütte+...)
(20 + 5 Gebäude, Distanz ca. 1 km)
- **Netzwerk**
 - alle Hauptgebäude 10 GE redundant verbunden
- **Mailserver:**
 - 8467 Mailboxen (Stand 24.9.2018!)
 - Studenten, Mitarbeiter, Gäste/Angehörige, Funktionsmail
- **Mailservice für Mitarbeiter der**
 - BU Weimar
 - HfM Weimar
 - Uni Erfurt

HPC Infrastruktur im zentralen Serverraum



HPC Infrastruktur Computecluster



Computecluster

98 CPU Knoten (2650v4 u. a.)
2500 cores; 12 TB + 10TB RAM
5,3 GByte/core RAM

Beegfs: 500 TB netto
(rechtes Rack)

Supermicro & Asus

HPC Infrastruktur GPU Cluster



GPU Cluster

12 GPU Knoten (2x8+5x4+5x1)
40x Nvidia A100 (40 GB),
600 cpu cores; 8 TB RAM

Supermicro & Gigabyte

HPC Infrastruktur Visualisierungscluster



Visualisierungscluster

10 Knoten

512..78GB RAM

Intel CPU 12..56 Cores

Nvidia Quadro GPU

HPC Infrastruktur - Backend

2 dhcp | tftp Server

2 Mgmtknoten ssh

csmgmt.tu-ilmenau.de

2 Mgmtknoten grafisch

2 IB Subnet Manager

Opensm 5.8.1

7 NFSv4 Fileserver

xf | acls

1 Monitoring Knoten

nagios

3 Transferknoten / 1 SMB Server

csdata.tu-ilmenau.de

Loginknoten

cslogin.tu-ilmenau.de

Auth Server

user | group | acls

HPC-Storage Übersicht

Vis-, GPU-, Compute, Backend- ...

Infiniband Fabric ~~HDR / EDR / FDR / QDR~~

7 Fileserver (XFS; NFSv4noRDMA, 30 Mio Dateien)

home 300 TB

data 100 TB

Storage area network (SAN)
infrastructure

Backup (Atempo)

daily & weekly
data & home

BeeGFS

scratch4

430/500 TB; 30 Mio Dateien

No Backup!

Landes- und Campuslizenzen & OpenSource

Fieldview Avizo Mathematica JupyterHub
Lumerical Matlab Paraview Keras
mkl/blas/lapack/scalapack Comsol Gaussian
Ensignt Totalview Meep Intel Libs
CFX OpenFoam Tecplot vasp Xilinx
Octave Fluent Visit Lammps
Anaconda PGI Compiler Cadence Cuda Intel Compiler
Tensorflow

... vom
Universitätsrechenzentrum
zum
IT-Zentrum der Thüringer Hochschulen
in 2021?



Aufgaben für die nächsten 3 Jahre

- **Forschungsorientierter Ausbau der HPC-Infrastruktur**
 - Die HPC Infrastruktur des HS-ITZ steht Wissenschaftlern aller Thüringer HS zur Verfügung
 - Übersicht über vorhandene Systeme auf der Webseite des HS-ITZ in Arbeit
 - Gemeinsame Nutzerverwaltung für HPC u. a. Services (Jupyterhub, ...) in Arbeit
 - Abbildung von lokalen Forschungsschwerpunkten in der Thüringer HPC-Infrastruktur
- **Kontinuierliche Angebote für Workshops und Schulungen**
 - Einarbeitung & Schulung neuer und fortgeschrittener Nutzer
 - Erstellung von Online Kursen
- **Beratung und Koordination von HPC Hardware Beschaffungen an Thür. HS**

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Fragen / Hinweise / Details ?