

Cluster Betrieb - High Performance Computing

Kurzbeschreibung

Das Rechenzentrum der Universität Freiburg bietet eingebettet in das bwHPC-Landeskonzept Hochleistungs-Rechenkapazitäten für Forschende aus dem Land Baden-Württemberg und für Wissenschaftler der Universität Freiburg an. Dies erfolgt für den Einstiegsbereich (bwHPC Tier-3) in drei Ausprägungen:

- Mit dem **bwForCluster NEMO** (Standort Freiburg) für **Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaft und Mikrosystemtechnik** für alle Wissenschaftler an baden-württembergischen Universitäten, die in diesen Fachbereichen forschen
- Mit den anderen bwForClustern für alle Wissenschaftler in Baden-Württemberg, die in den entsprechenden Disziplinen Forschung betreiben:
 - **bwForCluster JUSTUS** (Standort Ulm) für **Computational Chemistry**
 - **bwForCluster MLS&Wiso** (Standort Mannheim/Heidelberg) für **Wirtschafts- und Sozialwissenschaften sowie Molekulare Lebenswissenschaften**
 - **bwForCluster BinAC** (Standort Tübingen) für **Bioinformatik und Astrophysik**
- Mit dem **bwUniCluster** (Standort Karlsruhe) für alle anderen Forschungsbereiche und die Lehre als allgemeine HPC-Ressource im Land

Die Universität Freiburg beteiligt sich an der Grundversorgung der lokalen Wissenschaftler und Studenten durch einen Anteil von 10% am Karlsruher *bwUniCluster*.¹ Das entspricht einer Anzahl von etwa 840 Cores und 135 TByte Festspeicher (temporär + permanent) im Lustre-Dateisystem. Dieser Cluster steht seit Anfang 2014 zur Verfügung.

Die Aufbau und der Betrieb des bwForClusters NEMO am Standort Freiburg erfolgt durch die Abteilung eScience des Rechenzentrums. Über das landesweite Begleitprojekt bwHPC-C5 wurden dem HPC-System auch personelle Ressourcen anbei gestellt, die im Aufbau des bwHPC-Kompetenzzentrums ENM gemündet sind. Das Kompetenzzentrum ENM koordiniert landesweit die Beratung von Wissenschaftlern aus den Bereichen Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaft und Mikrosystemtechnik, die sich des bwForClusters NEMO bedienen wollen. Zur optimalen Ausnutzung des landesweit vorhandenen Expertenwissens kann die personelle Zusammensetzung des HPC-Kompetenzzentrums auch auf weitere Standorte erstrecken.

Neben der Bereitstellung von HPC-Kapazitäten über die oben genannten Landesressourcen besteht die Möglichkeit, vom Eigentümer betriebene HPC-Ressourcen in den Räumen des

¹ In Zukunft 6% am erweiterten System nach dem Ausbau.

Rechenzentrums zu hosten. Hierzu werden die Maschinensäle aktuell renoviert und ausgebaut. Für diesen Fall greift die Dienstbeschreibung "Machine-Hosting".

Verfügbare Information/Dokumentation

Die Dokumentation für die angebotenen Leistungen zum Bereich High Performance Computing befinden sich je nach Teilbereich des Angebots an verschiedenen Stellen.

- [HPC-Konzept des Rechenzentrums](#)
- Portal für Freiburger HPC-Aktivitäten und Information zum bwForCluster NEMO:
<http://www.hpc.uni-freiburg.de>
<http://www.nemo.uni-freiburg.de>
- Zentrale Webseite zu bwHPC und dem landesweiten Begleitprojekt bwHPC-C5:
<http://www.bwhpc.de>
- bwHPC Best-Practices-Wiki:
http://www.bwhpc-c5.de/wiki/index.php/Main_Page
- Freiburg HPC Newsletter
<http://www.hpc.uni-freiburg.de/news/newsletters>
- Governance und Aufwuchsfinanzierung (Beteiligungsmodelle) als Beiträge zum ZKI-Tagungsband "Kooperation in Rechenzentren" bei de Gruyter (2016)

Leistungsumfang

Der Betrieb und die Administration des bwForClusters NEMO erfolgt durch das Rechenzentrum der Universität Freiburg, wobei das HPC-Team in die Abteilung eScience eingebettet ist. Zusätzlich zur Betreuung der Hardware ist das HPC-Team auch für das Software-Umgebung und für die Konfiguration des HPC-Schedulings verantwortlich.

Der Hochleistungsrechner befindet sich derzeit in im Testlauf und wird schrittweise in Q3 2016 zur Verfügung stehen. Die Hardware besteht aus 756 Rechenknoten mit je 20 Cores, 128 GByte RAM und einer lokalen SSD mit 240GByte für temporäre Daten. Damit stehen den Wissenschaftlern aggregiert über 15000 Cores zur Verfügung sowie ein Gesamtarbeitsspeicher (RAM) von fast 100 Terabyte. Zusätzlich wird es anfänglich vier Spezialknoten mit XeonPhi-Prozessoren geben, die mit der im Juni 2016 veröffentlichten Knights-Landing-Architektur ausgestattet sind.

Vernetzt ist der bwForCluster NEMO mit 1 Gbit/s Ethernet für die Provisionierung der Rechenknoten und mit 100 GBit/s Omni-Path als Hochleistungsnetzwerk für HPC-Aufgaben. Der zentrale Storage ist als paralleler Speicher für die Bearbeitung von Simulations- und Analysedaten vorgesehen und ist mit einer Kapazität von 500 Terabyte auf schnellstmöglichen Zugriff auf die Daten ausgelegt. Hierfür kommt das parallele Dateisystem BeeGFs zum Einsatz. Dabei ist zu beachten, dass kein Backup der Daten erfolgt und eine permanente Speicherung von Daten ausgeschlossen ist. Idealerweise befinden sich die Daten nur während der Bearbeitung auf dem parallelen Storage, sowie aus praktischen Gründen kurze Zeit vor, nach und während zusammenhängenden Rechenaufgaben.

Für Daten kleineren Umfangs, bei denen die Zugriffsgeschwindigkeit weniger kritisch ist und die auch per Backup gesichert werden sollen, steht den Benutzern ein individuelles Home-Verzeichnis zur Verfügung, welches auf einem leistungsfähigen NFS-Server betrieben wird, der u.a. Snapshots und geo-redundant ausgelegt ist.

Komplementär zum Betrieb des Hochleistungsrechners bildet das HPC-Kompetenzzentrum ENM einen weiteren Schwerpunkt der Tätigkeiten des HPC-Teams. Das HPC-Kompetenzzentrum bündelt und koordiniert Aktivitäten zur Anwenderunterstützung in den Bereichen Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaft und Mikrosystemtechnik und bietet gezielt Dienstleistungen zur landesweiten Wissenschaftsunterstützung an, die auf die fachlichen Ausrichtungen des bwForClusters ENM abgestimmt sind.

Zu den Aufgaben des Kompetenzzentrums ENM zählen:

- Angebot fachspezifischer Beratungs- und Support-Angebote
- Unterstützung bei Migration laufender Projekte
- Erschließung neuer Anwendergruppen/Fachdisziplinen
- Identifizierung und Unterstützung von Nutzergruppen zur Weiterführung auf höhere Tier-Ebenen (Höchstleistungsrechner in Karlsruhe und Stuttgart)
- Bereitstellung fachspezifischer Software in Absprache mit User-Communities
- Identifizierung und Umsetzung von Optimierungsmaßnahmen
- Erstellung von Anwender-Dokumentationen (Best-Practice-Repository, FAQ)
- Dokumentation laufender und abgeschlossener Unterstützungsprojekte
- Dokumentation typischer Problemszenarien

Ziele

Den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern im Land sollen für ihre Disziplinen optimierte HPC-Ressourcen, bestehend aus Hardware, Software und Support auf der HPC-Einstiegsstufe (Tier-3) zur Verfügung gestellt werden. Dies soll bedarfsorientiert und zielgerichtet erfolgen. Die Anwender der Tier-3-Ebene unterteilen sich hierzu in zwei Gruppen:

1. Forscherinnen und Forscher, die den Fachdisziplinen der bwForCluster NEMO, BinAC, MLS&WISO und JUSTUS zugeordnet sind, werden von den jeweiligen HPC-Kompetenzzentren unterstützt und rechnen auf den entsprechenden bwForClustern.
2. Anwenderinnen und Anwender, die keiner der Fachdisziplinen der bwForCluster zugeordnet werden können, oder die dem Bereich Grundversorgung/Lehre zuzuordnen sind, werden mit dem von den baden-württembergischen Universitäten betriebenen Universalcluster (bwUniCluster) mit Standort in Karlsruhe mit HPC-Ressourcen unterstützt und versorgt. Unterstützung für den Einstieg von Freiburger Forschenden kann auch in diesem Fall vom Kompetenzzentrum ENM geleistet werden.

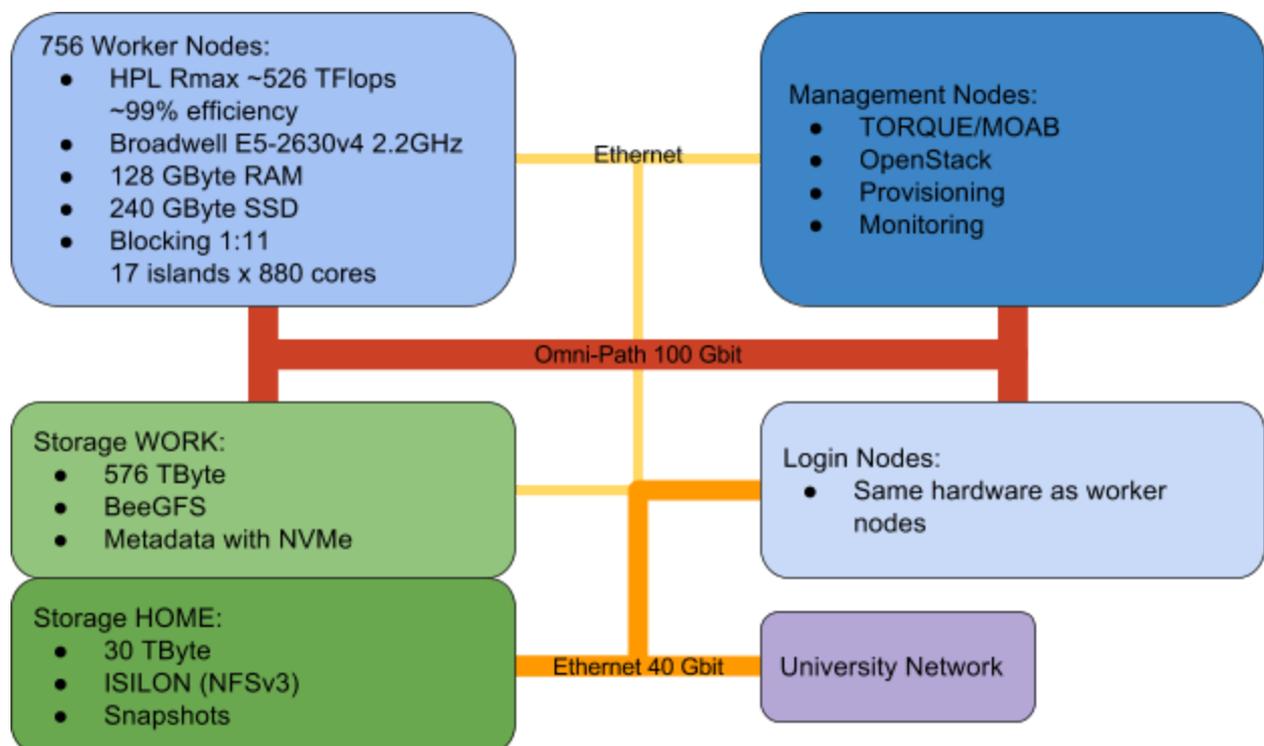
Damit bilden die bwForCluster gemeinsam mit dem bwUniCluster die Einstiegsebene der Leistungspyramide für HPC-Anwender aus den Universitäten des Landes Baden-Württemberg.

Zielgruppen

Die Zielgruppen des Dienstes sind die WissenschaftlerInnen der verschiedenen wissenschaftlichen Fachbereiche

- Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaft und Mikrosystemtechnik werden direkt durch das Freiburger HPC-Kompetenzzentrum ENM vor Ort versorgt und betreut
- Andere Bereiche werden durch das HPC-Team der eScience-Abteilung des Rechenzentrums angeleitet, wie sie die Ressourcen an anderen Standorten nutzen können.

Technische Beschreibung



Abhängigkeiten

Infrastrukturleistungen des Maschinensaals IIb (Strom, Kühlung) und Netzwerk. Abhängigkeit vom zentralen Storage-Server für User-Homeverzeichnis. Dieser ist selbst redundant ausgelegt. Wegen des hohen Energiebedarfs besteht lediglich USV-Absicherung für zentrale Komponenten der Steuerung und des parallelen Storage.

Zuständigkeiten

Für den Betrieb und den Support der HPC-Ressourcen ist die Abteilung eScience des Rechenzentrums der Universität Freiburg verantwortlich. Eingebettet in die Abteilung eScienc ist das bwHPC-C5 Kompetenzzentrum ENM zur landesweiten Unterstützung der Fachbereiche Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaft und Mikrosystemtechnik. Des weiteren ist das HPC-Team der Abteilung eScience zugeordnet. Dem HPC-Team obliegt der Betrieb der HPC-Systeme des Rechenzentrums und die allgemeine Unterstützung von Anwenderinnen und Anwendern bei Fragestellungen aus dem Bereich HPC.

Für den Support der Benutzerinnen und Benutzer wurden entsprechend den genannten Zuständigkeiten zwei OTRS-Queues im Ticketsystem des Rechenzentrums erstellt:

- enm-support@hpc.uni-freiburg.de für Fragen, die das HPC-Kompetenzzentrum ENM betreffen
- hpc-support@hpc.uni-freiburg.de für Fragen, die allgemeine HPC relevant sind

Für Fragen, die in ihrer Komplexität einfache Supportprobleme übersteigen, existiert die Möglichkeit im Rahmen der Kompetenzzentren und des bwHPC-C5 Begleitprojektes sogenannte Tiger-Teams zu bilden. Diese sind typischerweise standardortübergreifende und werden je nach Bedarf mit Mitgliedern der Betreiber, Benutzer und Experten aus den betroffenen Fachgebieten besetzt.

Im Fall von Problemen, die nicht zur Zufriedenheit der Benutzer geklärt werden können, kann die Fragestellung an den Landesnutzerausschuss (LNA)² als höchstes Gremium für die Vertretung von Benutzerinteressen eskaliert werden. Es empfiehlt sich jedoch, vorher zunächst eine Moderation über Governance-Strukturen anzustreben, die möglicherweise näher mit der Problemstellung vertraut sind. Hier sind an erster Stelle die Nutzerversammlung und der Cluster-Beirat zu nennen.

Qualitätsindikatoren

Die Qualitätsindikatoren für die Nutzung von Hochleistungs-Rechenressourcen unterscheiden sich je nach Sichtweise. Das Land Baden-Württemberg und die DFG als Geldgeber erwarten einen guten "Return-of-Invest" in Form von solide unterstützter Forschung und optimaler Auslastung der Systeme. Die Anwenderinnen und Anwender erwarten eine möglichst einfach bedienbare und bei Bedarf sofort verfügbare Umgebung:

- Nahe 100%ige Auslastung des Clusters (hierfür ist ein guter Backfill hilfreich)³
- Kurze Wartezeiten bis zur Bearbeitung der Jobs bei gutem Fairshare (hierzu können eine gute Jobklassifikation und opportunistische Ressourcen hilfreich sein)
- Niedrige Downtime für Maintenance durch geeignete Betriebsmodelle
- Flexible Forschungsumgebungen, z.B. durch Software-Umgebungen, die über virtuelle Maschinen bereitgestellt werden

² Vgl. hierzu ZKI-Tagungsband "Kooperation in Rechenzentren"

³ Stark von den abgesetzten Jobs und ihren Anforderungen abhängig

Durch ein geeignetes Monitoring werden den Nutzern, den Betreibern und den Geldgebern jeweils entsprechende Informationen bereitgestellt, die sowohl die Bewertung der aktuellen Auslastung als auch des gesamten Dienstes ermöglichen.

Leistungskennzahlen

Zu erhebende Kennzahlen werden zentral durch das bwHPC-C5-Begleitprojekt vorgegeben. Weitere könnten zur lokalen Steuerung verwendet werden.

- Erklärung: z.B. Anzahl aktiver Nutzer
- Belegung / Auslastung des Clusters (hier verschiedene Metriken)
- Belegung des zugeordneten Filespace

Budget und Personalausstattung

HPC-Team am RZ umfasst: Michael Janczyk 100%, Bernd Wiebelt 100 % (mit speziellem Fokus der Anwenderunterstützung), Anton Gamel (mit speziellem Fokus auf Teilchenphysik/ATLAS). Für den Forschungsteil zugeordnet ist derzeit noch Konrad Meier (Physik/Projekt VICE).