

HPC-Strategie der Universität Freiburg

[Executive Summary](#)

[bwHPC-Strategie in Baden-Württemberg](#)

[Qualitätsinitiative bwHPC-C5](#)

[HPC-Kapazitäten und Schwerpunkte auf Ebene 3 in BW \(Variante 1\)](#)

[Grundversorgung des Landes](#)

[Der Standort Freiburg bwForCluster NEMO \(Variante 2\)](#)

[Unterbringung der neuen und Konsolidierung der alten Hardware](#)

[Governance der HPC-Ressourcen](#)

[Konsolidierung der Administration](#)

[Betriebssystem](#)

[Ressourcenmanager und Scheduling](#)

[Netzwerk](#)

[HPC-Einheitsbetriebsmodell](#)

[Allgemeines Cluster-/Maschinenhosting \(Variante 3\)](#)

[Informationen zu HPC in Freiburg](#)

[Zugriff auf HPC-Ressourcen und Entitlements](#)

[Anhang: Begriffserklärungen und Ansprechpartner](#)

[Kompetenzzentren](#)

[Kompetenzzentren nach Standorten](#)

[Kompetenzzentrum bwUniCluster Karlsruhe](#)

[Kompetenzzentrum bwForCluster Freiburg](#)

[Kompetenzzentrum bwForCluster Mannheim/Heidelberg](#)

[Kompetenzzentrum bwForCluster Tübingen](#)

[Kompetenzzentrum bwForCluster Ulm](#)

[Tiger-Teams](#)

[Expertenpool](#)

[Astrophysik](#)

[Biomechanik](#)

[Crystallography \(Biologie\)](#)

[Elementarteilchenphysik](#)

[Genomik](#)

[Linux/Unix/SW-Bau/Scripting](#)

[Medizinische Physik](#)

[Mikrosystemtechnik](#)

[Molekulardynamik](#)

[Neurowissenschaften](#)

[Parallelprogrammierung \(MPI/OpenMP\)](#)

[Pharmazeutische Chemie und Biophysik](#)

[Systembiologie und strukturelle Biologie](#)

[Theoretische Chemie](#)

Executive Summary

Die Abteilung eScience des Rechenzentrums der Universität Freiburg verantwortet das HPC-Konzept und den Betrieb des in Beschaffung befindlichen bwFor-Clusters "NEMO" im Rahmen des bwHPC-Landeskonzepts. Die Universität Freiburg ist Mitglied im landesweiten Verbund und beschafft eine Anlage für 3,7 Millionen Euro, die im zweiten Quartal 2016 in Betrieb gehen soll. Die geplante Laufzeit der Basisinvestition liegt im Bereich 2016 bis 2020/1. Es konzentriert sich dabei auf die Wissenschaftsbereiche Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaften und Microsystemtechnik (ENM) in denen die Universität über eine hohe Konzentration von Arbeitsgruppen und Kompetenzen verfügt. Daraus ergibt sich einerseits ein Service für alle Forschenden der Landesuniversitäten dieser Bereiche in Freiburg und andererseits eine Weiterleitung von Forschenden anderer Forschungsbereiche an die komplementären Cluster im Lande. Zukünftige Investitionen und Entwicklungen an der Universität sind daher im Lichte des lokalen und der landesweiten HPC-Konzepts zu betrachten.

Für die Nutzung von HPC-Ressourcen in Freiburg ergeben sich drei Säulen gegen die jedes Forschungsvorhaben mit Compute-Bedarf sowie jede neue Beschaffung¹ geprüft werden sollte:

1. Das Forschungsvorhaben liegt entweder im Bereich der Kernkompetenzen der drei weiteren Cluster-Standorte (siehe Abschnitt zu den HPC-Kapazitäten) oder das Vorhaben soll² auf der Universalressource (bwUniCluster) laufen.
2. Das Forschungsvorhaben liegt im Bereich der Kernkompetenz des Freiburger Teils (bwForENM) des Landes-Cluster-Verbunds. Dann kann eine Nutzung und bei Bedarf eine Beteiligung zur Erweiterung dieses Clusters in Betracht gezogen werden.
3. Das Forschungsvorhaben soll auf eigener Hardware laufen, die im Maschinensaal (IIa/b) des Rechenzentrums gehostet wird.

Bei einer Beteiligung an den zentralen HPC-Ressourcen (Variante 1 oder 2) besteht die Möglichkeit einer Unterstützung der Antragstellung (nach 91b für die bwFor*Cluster und nach 143c für den bwUniCluster) zur Verdopplung der Antragssumme. Das Management, die Wartung und den Betrieb der Ressourcen erfolgt in beiden Fällen durch das jeweilige Rechenzentrum (in Variante 1 am entsprechenden Standort im Lande, in Variante 2 in Freiburg,) unter einer gewissen Beteiligung an den laufenden und Infrastruktur-Kosten.³ Beide Varianten erfolgen zu den von der jeweiligen Community beschlossenen Bedingungen (Governance). In Variante 3 erfolgt lediglich eine Unterbringung der Hardware in den Maschinensälen des RZ.⁴

Die Unterstützung der Umsetzung spezieller Anforderungen und wissenschaftlicher Fragestellungen erfolgt innerhalb der jeweiligen Anwender-Community bzw. über das bwHPC-C5 Begleitprojekt. Lösungen, wie der Einsatz Virtueller Forschungsumgebungen, sollen

¹ Beispielsweise im Zuge von Berufungen, Projekten etc.

² Beispielsweise weil es im Bereich der Lehre angesiedelt ist.

³ Hierzu wird ein entsprechendes Dokument auf bwHPC-Ebene entwickelt.

⁴ Die Rechte und Pflichten von Service-Anbieter (RZ) und Service-Nutzern regeln die Dokumente "Machine-Hosting - Bereitstellung von Rackspace in den Maschinensälen des RZ" und "Maschinensaalbenutzungsordnung".

schrittweise eingeführt werden. Dieses erfolgt gemeinsam mit ausgewählten Anwendern aus verschiedenen Wissenschafts-Communities in den Landesprojekten bwZWM⁵ und ViCE.⁶

bwHPC-Strategie in Baden-Württemberg

Das Land Baden-Württemberg investiert seit mehr als zehn Jahren in das High Performance Computing und unterstützt die Universitäten mit Zuwendungen und Projektgeldern, die bislang in der Summe deutlich über 200 Millionen Euro ausmachen. Das Land übernimmt hierfür die Investitionskosten für die Cluster-Erneuerung, während die jeweiligen Standorte (Rechenzentren der Universitäten) im Gegenzug für die Sicherstellung des Betriebs (Einrichtung, Wartung, Aktualisierung) aufkommen. Im Anschluss an das bis Ende 2012 geförderte bwGRiD-Projekt⁷ wurde ein integriertes Folgekonzept bwHPC formuliert, welches die zukünftigen Weiterentwicklungen im Bereich des High Performance Computing sowohl inhaltlich als auch organisatorisch beschreibt. Im Rahmen dieses Gesamtkonzeptes stellen die Folgeprojekte wie bwHPC-C5⁸ und die 2015/16 abgeschlossene Beschaffung der bwForCluster bzw. des bwUniClusters die logische Konsequenz aus den Erfahrungen, die mit dem bwGRiD-Projekt getätigt wurden, dar. Eine Überblicksdarstellung zu den laufenden Projekten bietet der Artikel "Aktuelle Umsetzungskonzepte der Universitäten des Landes Baden-Württemberg".⁹

Um eine möglichst hohe Wirksamkeit der Investitionen zu erzielen, erfolgt eine Zentralisierung der Ressourcen auf vier TIER-Leveln. Dabei sind die in einem Verbund organisierten bwForCluster auf der untersten Ebene (Tier 3) angesiedelt. Innerhalb dieses Verbundes werden gemeinsame Betriebsmodelle angestrebt, um eine einheitliche Nutzersicht zu erreichen. Die dadurch erzielbaren Synergieeffekte in Kombination mit einer effizienten Administration sollen die Forschende im Land in ihren verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen optimal unterstützen.

¹⁰ Mit Beantragung, Aufbau und Inbetriebnahme des *bwUniClusters in Karlsruhe* und der *bwForCluster an den vier Standorten* wurde gleichzeitig eine Qualitätsinitiative gestartet, die durch Spezialisierung und Schwerpunktbildung eine verbesserte Unterstützung der einzelnen Disziplinen mit ihren unterschiedlichen Anforderungen erzielen soll. Standorte konzentrieren sich auf bestimmte Themengebiete und konfigurieren den Cluster sowohl in technischer Hinsicht als auch hinsichtlich der eingesetzten Software nach den erwarteten Hauptanwendungen des jeweiligen Forschungsgebiets. Damit alle Mitglieder im Verbund weiterhin grundsätzlich auf alle Cluster-Kapazitäten zurückgreifen können, wird hierzu von Anfang an mit bwIDM eine einheitliche Authentifizierungsinfrastruktur geschaffen.¹¹

⁵ Vgl. Projektkurzinfo, <http://www.alwr-bw.de/kooperationen/bwzwm/>

⁶ Siehe Kurzbeschreibung, <http://www.alwr-bw.de/kooperationen/vice/>

⁷ Siehe hierzu: "Hochleistungsrechnen in Baden-Württemberg - Ausgewählte Aktivitäten im bwGRiD 2012", Konferenzband mit Beiträgen zu Anwenderprojekten und Infrastruktur im bwGRiD im Jahr 2012, Hrsg. Janne Chr. Schulz und Sven Hermann, im KIT Verlag erschienen

⁸ Begleitprojekt, siehe: <http://www.bwhpc-c5.de>

⁹ Siehe hierzu: PIK 2013/2, S. 99 ff., De Gryter/Saur

¹⁰ Ebd.

¹¹ Ebd.

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

Neben der optimalen Unterstützung der Wissenschaft durch abgestimmte Hardware- und Softwarekonzepte liegt ein weiterer besonderer Augenmerk der aktuell laufenden Projekte auf der Aus- und Weiterbildung von Nachwuchswissenschaftlern. Dies ist eine der vielen Erkenntnisse, die direkt aus dem bwGRiD-Projekt gewonnen und übernommen wurde: in Zukunft wird ein steigender Bedarf an im Umgang mit diesen Arbeitsumgebungen geschulte Benutzer erwartet. Diese Notwendigkeit wird in dem Projekt bwHPC-C5 (Coordinated Compute Cluster Competence Centers) aufgegriffen und mit entsprechenden inhaltlichen und personellen Konzepten begegnet. So wird die Unterstützung der Wissenschaftler bei der Nutzung der Cluster-Ressourcen durch Bildung von anwendungsspezifischen Kompetenzzentren, Nutzerbeiräten und der Evaluation neuer Technologien, wie Virtualisierung und spezialisierte Hardware, stetig ausgebaut und verbessert.

Qualitätsinitiative bwHPC-C5

Der alleinige Ausbau der Cluster genügt nicht, um schnell gute Ergebnisse zu erzielen. Mit der zweiten Runde der Förderung der Compute-Cluster im Land erfolgte in der ersten Phase mit dem Projekt bwHPC-C5 eine Reihe ergänzender Maßnahmen, wie die Spezialisierung der Standorte auf bestimmte fachspezifische Fragestellungen des Cluster-Rechnens ebenso wie Workshops und Weiterbildungen für die involvierten Wissenschaftler, geben. Das bestehende Anwender-Know-How sollte dabei effektiver verbreitet und bestimmte Herausforderungen in spezialisierten Tiger-Teams bearbeitet werden. Zudem wurden Kapazitäten eingeplant, um eine Optimierung der Hardwarenutzung zu erreichen, beispielsweise durch Virtualisierung und optimale Anpassung der Node-Konfiguration an die jeweiligen Jobs. Die Aufgabe der HPC-Kompetenzteams liegt in den Bereichen:

- Analyse der Effizienz der eingesetzten Software und Algorithmen,
- Beratung für die Verbesserung der Programmierung und
- Verbesserung des Austauschs der einzelnen Anwender-Communities untereinander.

Darüberhinaus wurde ein landesweiter Nutzerbeirat, der Landesnutzerausschuss (LNA) eingeführt, an den sich die Nutzer bei Problemen oder im Falle einer Benachteiligung wenden können. Die Kontaktdaten des Freiburger Vertreters sowie die Daten der Kompetenzteams sind im Anhang zu diesem Dokument aufgelistet.

HPC-Kapazitäten und Schwerpunkte auf Ebene 3 in BW (Variante 1)

Nach den Erfahrungen mit der Zentralisierung und der Skalierung der Cluster-Größen im bwGRiD erfolgt nun mit den vier *bwForClustern* eine Spezialisierung der jeweiligen Infrastruktur. Die vier *bwForCluster* sind jeweils eigenen inhaltlichen Schwerpunkten und Themengebieten zugeordnet:

- Mannheim/Heidelberg übernimmt die Bereiche "*Wirtschafts- und Sozialwissenschaften, Systembiologie und strukturelle Biologie*" (Cluster verfügbar),
- Ulm ist für den Bereich "*Theoretische Chemie*" zuständig (Cluster verfügbar),

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

- Tübingen zeichnet für die Bereiche “*Bioinformatik und Astrophysik*” verantwortlich (Start für Q3/2016 avisiert) und
- Freiburg kümmert sich um die Schwerpunkte “*Neurowissenschaften, Mikrosystemtechnik und Elementarteilchenphysik*” (Start für Q2 geplant).

An jedem der vier Standorte werden HPC-Kompetenzzentren für die Themengebiete aufgebaut. Deren Aufgabe ist die gezielte Unterstützung der Wissenschaftler durch eine Vielzahl an Maßnahmen:

- Förderung des Austauschs von Informationen zwischen den wissenschaftlichen Communities im Bundesland,
- Aufbau von *Tiger-Teams* bei Problemen mit grundsätzlicher Bedeutung (wie z.B. Portierung von häufig genutzten Softwarepaketen),
- Organisation von Workshops und Ergebniskonferenzen usw.

Die bwForCluster stehen allen Forschenden im Bundesland grundsätzlich zur kostenfreien Nutzung zur Verfügung - vorausgesetzt, er oder sie forscht in einem der vorgenannten Bereiche. Sollte das nicht der Fall sind, übernimmt das Universalcluster *bwUniCluster* in Karlsruhe die Grundversorgung der Wissenschaftler im Lande. Werden Gruppen mit einem sehr großen Rechenbedarf entweder auf einem der bwForCluster oder dem bwUniCluster identifiziert, ist es die Aufgabe der jeweiligen Kompetenzzentren diese bei dem möglichst reibungslosen Übergang auf die nächste Ebene zu unterstützen (Tier 2 ForHLR, Tier 1 Hermit).

¹²

Grundversorgung des Landes

Freiburg beteiligt sich an der Grundversorgung und zur Unterstützung der Lehre¹³ der Standort-lokalen Forschenden und besitzt einen Anteil von 10% am bwUniCluster in Karlsruhe.¹⁴ Das entspricht einer Anzahl von etwa 840 Cores und 135 TByte Festspeicher (temporär + permanent) im Lustre-Dateisystem. In diesem Cluster ist ein Teil der Kapazitäten bereits durch Berufungszusagen des Rektorats reserviert. Die Zugriffsmodalitäten werden in regelmäßigen Infoveranstaltungen und über die zentrale Webseite¹⁵ erläutert. Ebenso gibt es eine Webseite für die Freiburger Aktivitäten.¹⁶ Über den Punkt “Services” auf der Rechenzentrumsseite wird es einen zusätzlichen Einstiegspunkt “Computing / HPC” bzw. “Rechenressourcen” für Wissenschaftler geben.

Der Standort Freiburg bwForCluster NEMO (Variante 2)

Der Standort Freiburg übernimmt gemäß des landesweiten HPC-Konzeptes Schwerpunkte in den Bereichen Elementarteilchenphysik, Neurowissenschaften und Mikrosystemtechnik (ENM)

¹² Ebd.

¹³ Die bwFor*Cluster sind wegen der DFG-Förderung der Wissenschaft vorbehalten, der bwUniCluster dient explizit auch der Ausbildung.

¹⁴ Auslastungszahlen, siehe: <http://www.hpc.uni-freiburg.de/bwclusters/bwunicluster>

¹⁵ Siehe hierzu die bwHPC-C5 Seite: <http://www.bwhpc-c5.de>

¹⁶ Siehe hierzu: <http://www.hpc.uni-freiburg.de>

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

für alle Forschenden im Land und konzipiert den Cluster entsprechend der Anforderungen dieser Anwender. Dazu wurden alle Wissenschaftsgruppen in Baden-Württemberg identifiziert, die entsprechende Projekte auf dem Cluster rechnen wollen. In einer Erhebungsphase wurden die für diese Projekte notwendigen Soft- und Hardwareanforderungen gesammelt und evaluiert. Sie flossen über die Konzeption der Hardware- und Softwareausstattung und auch als "Anhang" in den Forschungsantrag ein. Den Wissenschaftlern bot sich somit die Chance, das Cluster nach ihren Vorstellungen zu gestalten. Beteiligung an der konzeptionellen Weiterentwicklung und Qualitätssicherung werden durch die ENM Cluster Governance geregelt.¹⁷

Unterbringung der neuen und Konsolidierung der alten Hardware

Der beantragte bwForCluster für den Freiburger Standort wird über eine Investitionssumme von 3,7 Millionen Euro für Hardware und Software verfügen. Er stellt damit alleine schon aufgrund der Größe der Investition den zukünftigen größten Anteil an "zusammenhängenden Systemen" im Rechenzentrum dar und wird daher in den Mittelpunkt vieler wenn nicht aller Betrachtungen rund um die Fragen wie Aufstellung, Kühlung und Betrieb rücken. Zudem müssen mögliche Erweiterungen durch von Dritter Seite eingebrachte Mittel berücksichtigt werden. Ziel aller aktuellen und zukünftiger Planungen ist es deshalb sowohl den Parametern und Anforderungen, die die neue Hardware stellt, gerecht zu werden, als auch einen optimalen Service und eine möglichst hohe Zufriedenheit bei allen Kunden des Rechenzentrums zu gewährleisten.

Für den neuen Cluster müssen entsprechende Energie-, Kühlungs- und Platzkapazitäten vorgesehen werden. In diesem Zuge werden die Maschinsäle im Rechenzentrum saniert bzw. erweitert. Dieses bedeutet einen schrittweisen Abbau und Wiederaufbau von Datenschränken, den kompletten Austausch der Verkabelung und die Verbesserung der Klimatisierung. Das reduziert die verfügbare Stellfläche im Saal, so dass schrittweise die Zahl der aufgebauten Schränke konsolidiert werden muss. Der Cluster selbst wird im neu geplanten Maschinsaal IIb untergebracht.

Teile des BFG-Clusters sind deutlich in die Jahre gekommen und verfügen nicht mehr über zeitgemäße Hardware, Ausnahmen bilden ausgewählte Beschaffungen wie z.B. für Atlas/CMS. Dazu wird für die aktuellen Benutzergruppen gemeinsam ein Migrationsplan entwickelt, der vorsieht, dass je nach Job- und Nutzungsszenario entweder eine zeitnahe Migration der Jobs auf die vorhandene Pre-bwForCluster-Infrastruktur¹⁸ oder auf die zentralen Kapazitäten des bwUniCluster in Karlsruhe durchgeführt wird. Im Zuge der Maschinsaalkonsolidierung und Verbesserung der Kühlversorgung würde eine Verlagerung und Konsolidierung der Kapazitäten in den Maschinsaal IIa/b für Ende 2016 angestrebt.

Governance der HPC-Ressourcen

Das Land und die Universitäten in Baden-Württemberg haben in den vergangenen Jahren eine

¹⁷ Dieses Dokument wurde schrittweise mit den Teil-Communities entwickelt und steht unter <http://www.hpc.uni-freiburg.de> zur Verfügung.

¹⁸ Bis zur Betriebsaufnahme der neuen Hardware werden alte bwGRiD-Komponenten für das Einrichten eines Testsystems zur Vorbereitung des Starts von NEMO zum Rechnen angeboten.

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

neue, intensivere Form der Kooperation und der Zusammenarbeit insbesondere im Bereich HPC und Datenhaltung eingeleitet. Die vom MWK und der DFG geförderte Kooperation soll daher mehrere Aspekte der standortübergreifenden Zusammenarbeit abdecken: zum einen werden auf diese Weise Kommunikations- und Organisationskanäle geschaffen, die notwendig sind, um gemeinsame Vorhaben zu planen und zu realisieren. Zum anderen können sich die beteiligten Kooperationspartner auf ihre Stärken konzentrieren und das (eigene) Profil weiter schärfen und ausbauen. Das landesweite und die lokalen HPC-Konzepte müssen, damit sich tragfähig und nachhaltig wirken können, in die Betriebslandschaft der Rechenzentren bzw. der Infrastrukturen der beteiligten Akteure eingebettet werden. Die Grenzen zwischen rein wissenschaftlichen Geräten und Prozessen und betrieblichen Abläufen bzw. Infrastrukturen verwischen zunehmend. Diese Entwicklung ist eine gewollte und logische, weil notwendige, Konsequenz aus der Verstärkung der Kooperation auf allen Ebenen.

Insgesamt kristallisieren sich zwei wesentliche Handlungsfelder heraus: Die Notwendigkeit eine tragfähige, einfache und transparente Form der gegenseitigen Leistungserbringung und -abrechnung zu realisieren und gleichzeitig geeignete Governance-Strukturen zu installieren, die die Ansprüche und Rechte der Partner auf verschiedenen Ebenen ausgleichen. Ohne diese teilweise noch zu formalisierenden und vereinbarenden Strukturen, wird die Entwicklung höher integrierter Kooperationen und verteilt erbrachter Landesdienste zunehmend schwieriger bis unmöglich, da teilweise erhebliche Sachmittel und personelle Ressourcen an einzelnen Standorten für einen Cluster aufgebracht werden müssen (selbst wenn sie dafür an anderer Stelle nicht mehr anfallen).

Zusätzliche HPC-Maschinen aus Berufungs-, Instituts-, Projekt- oder Arbeitsgruppenbudgets können als Erweiterung der bestehenden oder des neuzubeschaffenden Clusters aufgenommen werden, unter der Bedingung, dass sie sich direkt der zentralen Administration und Monitoring unterstellen. Gleichzeitig sind die Vorgaben an Bauform und Netzwerkinfrastruktur einzuhalten.

Konsolidierung der Administration

Das Rechenzentrum hat über einen Zeitraum von knapp zehn Jahren Erfahrungen im Umgang mit und der Administration von HPC-Systemen gesammelt. Diese müssen nun gebündelt und ausgewertet werden, damit die kommenden Hardwareumgebungen möglichst effizient und optimal betrieben werden können. Dazu zählt die Verbesserung der Redundanz in der Administration, eine bessere Wartbarkeit und die Konzentration auf die höheren Dienstebenen.

Das Ziel ist die Verbesserung der Verfügbarkeit der Cluster, die schnelle Reaktion auf neue Anforderungen und die Verkürzungen von Down-Times. Gleichzeitig steigen die Anforderungen an die Absicherung der Systeme gegen unbefugte Dritte und den Datenschutz. Ebenso muss für langfristige Planungen und sinnvolles Ressourcenmanagement ein ständiger Überblick über den installierten Maschinenpark bestehen. Deshalb soll die Maschinenadministration vereinheitlicht werden, um einerseits Synergieeffekte zu erzielen und andererseits einen größeren Pool an verfügbarem Personals für Administrations- und Wartungsaufgaben sowie

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

Notfalleinsätze zu haben. Deshalb wurde für die bestehenden Cluster-Ressourcen angestrebt ein vollständiges Update der Basissoftware auf die aktuelle Version der bwFor- und bwUniCluster zu erreichen. Gleichzeitig besteht das mittelfristige Ziel für 2016 den Clusterbetrieb übergreifend zu vereinheitlichen.

Betriebssystem

Während sich Hardwarekonfiguration und Ausstattung an Anwendungssoftware teilweise erheblich unterscheiden können, sind die grundsätzlichen Betriebsparameter der einzelnen Rechenknoten sehr ähnlich. Sie verwenden in der Regel ein Linux-Derivat einer bestimmten Distribution und Version, das auf alle beteiligten Nodes mehr oder weniger identisch aufgespielt wird. Dieses ist die zentrale Betriebsebene, über die sich Vereinfachungen und Standardisierungen erreichen lassen.

Ressourcenmanager und Scheduling

In einem HPC Cluster haben die Benutzer keine direkte Kontrolle darüber, zu welchem Zeitpunkt und auf welchen Maschinen ihre Jobs ausgeführt werden. Die Ressourcen werden von einem Ressourcen-Manager verwaltet, der die genaue Konfiguration und den aktuellen Zustand der Rechenknoten kennt. Verteilt werden die Jobs der Benutzer durch einen Scheduler, der sicher stellt, dass die Ressourcen den jeweiligen Nutzeranteilen entsprechend optimal ausgenutzt werden. Konkret kommen im bwUniCluster und in den bwFor-Clustern die Kombinationen Slurm/Moab und Torque/Moab (Ressourcen-Manager/Scheduler) zum Einsatz. Slurm und Torque sind beides Open-Source Ressourcen-Manager. Moab ist eine kommerzielle Scheduler-Software, die Lizenzen dafür sind aber für die bwFor-Cluster bereits vorgesehen. Perspektivisch könnte in Zukunft Slurm auch den Part des Schedulers übernehmen.

Netzwerk

Ebenso soll es Neuüberlegungen für das Layout des Cluster-Netzwerks geben, die einerseits die Einbindung von neuen Knoten erleichtert, andererseits den Zugriffs- und Sicherheitsanforderungen gerecht wird. Auf den darüberliegenden Ebenen wird sich für die Anwender nichts Wesentliches ändern: Ihre Applikationen und Spezialanwendungen stehen weiterhin zur Verfügung, die Freiheit der Wissenschaftler bleibt selbstverständlich erhalten.

HPC-Einheitsbetriebsmodell

Die Aktivitäten, die sich rund um die Reorganisation und Konsolidierung der Hardware-, Netzwerk- und Softwareinfrastruktur im Bereich des HPC in Freiburg aufspannen, haben zum Ziel, ein HPC-Einheitsbetriebsmodell zu etablieren.

Analog zu den Entwicklungen im Storage-Bereich, wo eine Konsolidierung der verschiedenen Storage-Inseln durch den Kauf und Inbetriebnahme einer großen Storage-Appliance bereits im Gange ist, sollen die notwendigen Planungs- und Organisationsaktivitäten im Bereich des HPC dazu genutzt werden, um sowohl inhaltlich als auch personell

1. einen ersten "Break-Point" durchzuführen, bei dem von allen Beteiligten kontinuierlich die bislang gemachten Erfahrungen im Rahmen eines Informationsaustausches und der

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

- Entwicklung von Best-Practices dokumentiert und zusammenführt werden, um so
2. die kommenden Entwicklungen (Planung, Kauf und Inbetriebnahme des bwForClusters, Abschalten alter Hardware und des bwGRiDs, verstärkte Serviceorientierung gegenüber den Nutzergruppen etc.) neu auszurichten.

Das umfasst in erster Linie die Hardwareorganisation, aber natürlich auch darüber hinaus auch die personelle Struktur. Die HPC-Gruppe wurde umgebaut und der Abteilung eScience am Rechenzentrum zugeordnet.

Das HPC-Einheitsbetriebsmodell umfasst die Lösung von Fragestellungen wie dem dynamischen Provisionieren von Ressourcen bis hin zu Fragen wie der Integration von heterogener Hardware genauso wie die Bearbeitung von grundsätzlichen betrieblichen Prozessen wie dem Management des Inventars (Inventorymanagement) oder der Verwaltung des Netzwerks und der Netzwerkkonfiguration(en) durch die mandantenfähige Software der Netzwerkabteilung.

Das angestrebte HPC-Einheitsbetriebsmodell ist daher aufgrund seiner umfangreichen Berührungspunkte mit den verschiedensten Abteilungen und Aufgabengebieten des Betriebs des Rechenzentrums von einem allgemeinen Charakter und muss sich deshalb zukünftig nicht notwendigerweise nur auf den Bereich des HPC beschränken. Da es als ein "sich kontinuierlich verbessernder Prozess" aufgefasst und formuliert wird, soll die Eignung des HPC-Einheitsbetriebsmodells für weitere Schwerpunkte des Rechenzentrums geprüft und umgesetzt werden.

Allgemeines Cluster-/Maschinenhosting (Variante 3)

In bestimmten Szenarien, wie beispielsweise bei sehr schutzwürdigen Daten oder sehr speziellen Anwendungen, besteht die Möglichkeit Cluster-Ressourcen im Maschinensaal I (schutzwürdig) bzw. IIa/b (hohe Anforderungen an Energie/Klimatisierung) des Rechenzentrums unter bestimmten Bedingungen unterzubringen. Das Rechenzentrum muss als zentrale Einrichtung der Universität verstärkt die Belange von Green-IT und dem verantwortungsvollen Umgang mit Ressourcen beachten. Gleichzeitig sind die verfügbaren räumlichen und energetischen Kapazitäten am Standort in der Herrmann-Herder-Straße beschränkt. Neben dieser Problematik erhöhen sich gleichzeitig die Herausforderungen an Datensicherheit und Datenschutz seitens der Benutzer und der im Einsatz befindlichen Nutzungsszenarien. Diese Aktivitäten müssen deshalb mit einem strikteren und konsistentem Inventory-Management untermauert werden. Das Rechenzentrum stellt die benötigte Kapazität wassergekühlter Schränke in Maschinensaal IIa und IIb bereit.¹⁹

¹⁹ Der Maschinensaal IIa/b erfordert einen speziell auf die lokale Situation zugeschnittene, wassergekühlte Schränke. Diese müssen von einem einheitlichen Typ sein und Exakt vom Aufstell- und Anschlußmaß her passen. Daher wird statt des klassischen kundenfinanzierten Modells ein zentrales Modell gefahren werden. Durch ein klares Hosting-Modell lässt sich der Wildwuchs verschiedener Serverräume auf dem Campus eindämmen und eine energieökonomische Gesamtlösung erreichen.

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

Ab sofort gilt daher eine Maximallaufzeit von Maschinen von fünf Jahren mit einer anschließenden Möglichkeit der Übernahme in eigene Regie und Kapazitäten (Details regelt die MsBO). Jede Maschine wird hierfür in Zukunft mit Aufstellungsdatum und Zuständigem versehen und es erfolgt einmal im Jahr die Aktualisierung der Daten. Eine geplante verlängerte Aufstellung muss gesondert beantragt werden, da Ressourcen automatisch wieder in den Planungspool zurückfallen.

Die Rechte und Pflichten der Aufsteller finden sich in den Dokumenten "Machine-Hosting - Bereitstellung von Rackspace in den Maschinensälen des RZ" und der "Maschinensaalbenutzungsordnung".

Informationen zu HPC in Freiburg

Für aktuelle Informationen zu allen Services des RZ rund um HPC, Schulungstermine etc. besteht ein eigenes CMS-Portal www.hpc.uni-freiburg.de, welches mittelfristig die bisherig getrennt geführten Instanzen www.bfg und www.bwgrid aufnehmen wird. Darüberhinaus wurde eine einheitliche Support-Ticket-Queue eingerichtet: hpc-support@hpc.uni-freiburg.de.

Über aktuelle Entwicklungen wird in regelmäßigen Abständen in einem HPC-Newsletter (in englischer Sprache, um den internationalen Charakter der Forschungsgruppen gerecht zu werden) informiert, der durch eine Mail an hpc-news-subscribe@hpc.uni-freiburg.de abonniert werden kann.

Für das Hosting selbst administrierter Ressourcen gilt die Dienstbeschreibung "Machine-Hosting" und die Maschinensaalbenutzungsordnung (MsBO) des Rechenzentrums.

Zugriff auf HPC-Ressourcen und Entitlements

Um auf die (zukünftige) bwDienste (z.B. bwUniCluster, bwFileStorage oder bwForCluster) zugreifen zu können, muss durch den jeweiligen Uni-Identity-Provider (myLogin/myAccount für Universität Freiburg) eine Berechtigung (entitlement) geliefert werden, die aus dem LDAP gelesen wird. Hierfür muss ein bestimmtes Flag durch die Benutzerverwaltung eingetragen werden. Berechtigt zur Nutzung der HPC-Ressourcen sind alle erstmal alle Wissenschaftler des Landes durch formlosen Antrag. Die Authentifizierung der Nutzer erfolgt durch das zentrale Identity Management (bwIDM/Shibboleth).

Anhang: Begriffserklärungen und Ansprechpartner

Dieser Anhang wurde aus dem Wiki des bwHPC-C5-Projektes übernommen:
https://projects.uni-konstanz.de/projects/bwhpc-c5_tap1-1/wiki, Stand 16.04.2014

Kompetenzzentren

Unter einem Kompetenzzentrum ist im Sinne von bwHPC-C5 eine organisatorische Struktur zu verstehen, in der Fachkompetenzen zur Anwenderunterstützung in den verschiedenen Wissenschaftsbereichen der bwHPC-Cluster gebündelt werden.

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

Für jeden Betreiberstandort der fünf bwHPC-Cluster ist genau ein Kompetenzzentrum zu etablieren. Jedes dieser fünf Kompetenzzentrum bietet gezielt Dienstleistungen zur landesweiten Wissenschaftsunterstützung an, die auf die jeweilige(n) fachliche(n) Ausrichtung(en) des zugehörigen bwHPC-Clusters abgestimmt sind.

Zu den Aufgaben der Kompetenzzentren gehören:

- Aufbau 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
- Bereitstellung fachspezifischer Software
- Identifizierung und Umsetzung von Optimierungsmaßnahmen
- Erstellung von Anwender-Dokumentationen (Best-Practice-Repository, FAQ)
- Dokumentation laufender und abgeschlossener Unterstützungsprojekte
- Dokumentation typischer Problemszenarien

Der Sitz eines Kompetenzzentrums ist formell dem Betreiberstandort des jeweiligen thematisch ausgerichteten bwHPC-Clusters zugeordnet. Zur optimalen Ausnutzung des landesweit vorhandenen Expertenwissens erfolgt die personelle Zusammensetzung der Kompetenzzentren jedoch prinzipiell standortübergreifend.

Kompetenzzentren nach Standorten

Kompetenzzentrum bwUniCluster Karlsruhe

- Schwerpunkt: Fachübergreifende Applikationen zur Grundversorgung und Lehre
- Lokale Koordination / Kontakt (komm.)
 - Robert Barthel <robert.barthel@kit.edu>
 - Tobias König <tobias.koenig@kit.edu>
- Mitglieder
 - Juergen Salk <juergen.salk@uni-ulm.de>

Kompetenzzentrum bwForCluster Freiburg

- Schwerpunkt: Neurowissenschaften, Mikrosystemtechnik, Elementarteilchenphysik
- Lokale Koordination / Kontakt
 - Michael Janczyk <michael.janczyk@rz.uni-freiburg.de>
 - Bernd Wiebelt <bernd.wiebelt@rz.uni-freiburg.de>
- Mitglieder
 - Janne Schulz <janne.schulz@rz.uni-freiburg.de>
 - Raphael Pesche <raphael.pesche@rz.uni-freiburg.de>
 - Gevorg Poghosyan <gevorg.poghosyan@kit.edu>

Kompetenzzentrum bwForCluster Mannheim/Heidelberg

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

- Schwerpunkt: Wirtschafts- und Sozialwissenschaften, Molecular Life Science
- Lokale Koordination / Kontakt
 - Sabine Richling <richling@urz.uni-heidelberg.de>
 - Heinz Kredel <kredel@rz.uni-mannheim.de> (Vertretung)

Kompetenzzentrum bwForCluster Tübingen

- Schwerpunkt: Bioinformatik, Astrophysik
- Lokale Koordination / Kontakt
 - Marek Dynowski <marek.dynowski@uni-tuebingen.de>
 - Werner Dilling <werner.dilling@uni-tuebingen.de> (Vertretung)
- Mitglieder
 - Philipp Brachvogel
 - Kevin Körner

Kompetenzzentrum bwForCluster Ulm

- Schwerpunkt: Theoretische Chemie
- Lokale Koordination / Kontakt
 - Christian Mosch <christian.mosch@uni-ulm.de>
 - Karsten Siegmund <karsten.siegmund@uni-ulm.de> (Vertretung)
- Mitglieder
 - Rainer Rutka <rainer.rutka@uni-konstanz.de>
 - Robert Barthel <robert.barthel@kit.edu>
 - Marek Dynowski <marek.dynowski@uni-tuebingen.de>

Tiger-Teams

Tiger-Teams stellen ein wesentliches Instrument zur gezielten Anwenderunterstützung dar. Ein Tiger-Team ist Teil des jeweiligen Kompetenzzentrums und wird durch dieses mit der konkreten Umsetzung von Unterstützungs- und Optimierungsmaßnahmen "vor Ort" beauftragt. Die Zusammensetzung eines Tiger-Teams kann standortübergreifend erfolgen, um das an unterschiedlichen Standorten vorhandene Expertenwissen optimal zu nutzen. Dazu wird ein landesweiter Expertenpool etabliert, in dem verschiedene Kernkompetenzen vertreten sind (z.B. zu Anwendersoftware, Entwicklungswerkzeugen und -techniken, Bibliotheken). Tiger-Teams operieren prinzipiell standortübergreifend und interagieren dabei direkt mit zuvor festgelegten wissenschaftlichen Nutzergruppen.

Denkbare Einsatzszenarien der Tiger-Teams sind z.B.:

- Unterstützung bei der Portierung von Anwendungen auf die bwHPC-Cluster
- Anpassung bestehender Programmcodes, wie etwa prozessorspezifische Einzelkern-Optimierungen
- Parallelisierung sequenzieller Programmteile mittels OpenMP und MPI
- Verbesserungen in den Build-Konfigurationen
- Einbindung leistungsoptimierter Bibliotheken (z.B. Intel MKL, AMD ACML)
- Implementierung von Checkpointing/Restart-Funktionen zur Erhöhung der

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016

Fehlertoleranz

- Umsetzung von Optimierungsmaßnahmen in den Nutzungskonzepten
- begleitende Unterstützung und Betreuung neuer Anwendergruppen

Im Unterschied zum übergeordneten Kompetenzzentrum erfolgt die personelle Zusammensetzung eines Tiger-Teams anlassbezogen und wird sich zeitlich flexibel an konkreten Projektanforderungen orientieren.

Expertenpool*Astrophysik*

- Sabine Richling <richling@urz.uni-heidelberg.de>

*Biomechanik*Crystallography (Biologie)

- Kay Diederichs <kay.diederichs@uni-konstanz.de>

*Elementarteilchenphysik**Genomik**Linux/Unix/SW-Bau/Scripting*

- Rainer Rutka <rainer.rutka@uni-konstanz.de>
- Rainer Keller <rainer.keller@hft-stuttgart.de>
- Michael Janczyk <michael.janczyk@rz.uni-freiburg.de>

Medizinische Physik

Jürgen Salk <juergen.salk@uni-ulm.de>

*Mikrosystemtechnik**Molekulardynamik*

- Kay Diederichs <kay.diederichs@uni-konstanz.de>
- Karsten Schäfer <karsten.schaefer@uni-konstanz.de>

*Neurowissenschaften**Parallelprogrammierung (MPI/OpenMP)*

- Rainer Rutka <rainer.rutka@uni-konstanz.de>
- Andreas Klimas (evtl. neuer Mitarbeiter)
- Rainer Keller <rainer.keller@hft-stuttgart.de>
- Sabine Richling <richling@urz.uni-heidelberg.de>

Beschluss: 16.10.2014 - nächste Iteration für Version 2016*Pharmazeutische Chemie und Biophysik*

- Thomas Exner <thomas.exner@uni-tuebingen.de>

Systembiologie und strukturelle Biologie

- Thomas Exner <thomas.exner@uni-tuebingen.de>

Theoretische Chemie

- Thomas Exner <thomas.exner@uni-tuebingen.de>
- Christine Peter <christine.peter@uni-konstanz.de>