

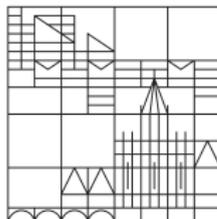
Infrastrukturplattform SCCKN

Kick-Off-Meeting

S. Gerlach

Nov. 5, 2014

Universität
Konstanz



- ▶ 15.1.2013: 1. AFF Antrag Infrastrukturplattform
- ▶ 26.5.2013: Absprache:
 - ▶ Investition in bwUniCluster und Wiederantrag nach Erfahrungen mit bwUniCluster
 - ▶ Aufbau lokaler Cluster aus eigenen Mitteln
- ▶ Aug.-Sep. 2013: **Einrichtung SCC in der Physik** (1. Ausschreibungsrunde)
- ▶ 13.1.2014: 2. AFF Antrag Infrastrukturplattform
- ▶ 11.6.2014: **Bewilligung mit Absprache:**
 - ▶ Weitere Investition in bwUniCluster
 - ▶ Beteiligung am Ausbau von SCCKN (50 kEUR)
- ▶ Sep. 2014: **Erweiterung SCC zu SCCKN** (2. Ausschreibungsrunde)

Während dessen: Immer wieder Erweiterungen durch einzelne Gruppen

SCCKN - Infrastrukturplattform - Warum?

- ▶ Lokale Datenspeicherung und -zugriff (Arbeitsplatzrechner, interaktiv)
- ▶ Flexible Hardwareausstattung (GPU, RAM, neueste Hardware)
- ▶ Unkomplizierte finanzielle Beteiligung (kurzfristig und mitbestimmt)
- ▶ Flexible Nutzung (Lange Laufzeiten, Ausnutzung der Ressourcen)
- ▶ Spezielle und optimierte Software
- ▶ Vorort Support mit Know-how in KN
- ▶ Lokale Cluster haben sich bewährt (> 10 Jahre)

Negative Erfahrungen mit Landesrechnern:

- ▶ Investitionen teilweise seit 2,5 Jahren nicht umgesetzt
- ▶ Versprochene Anforderungen (Lange Laufzeiten, GPU, Speicher) bisher nicht erfüllt
- ▶ Große Zeitverzögerungen und schlechte Informationspolitik

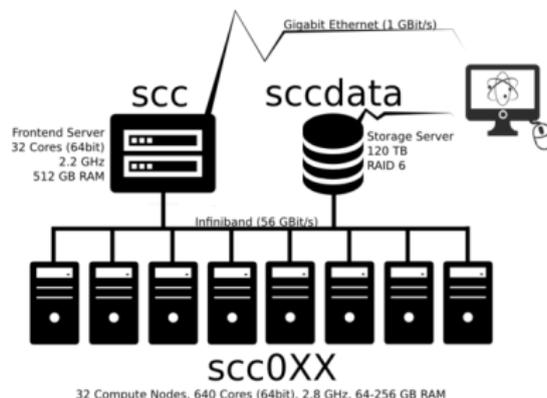
- ▶ SFB 767
- ▶ SFB TR 6
- ▶ Fachbereich Physik
- ▶ Theoretische Physik (Gruppe Fuchs, Belzig, Burkard, Nowak, Nielaba, Pauly)
- ▶ Fachbereich Chemie (Gruppe Peter, Winter)

Infrastrukturplattform SCCKN zusätzlich

- ▶ Experimental Physik (Gruppe Boneberg, Dekorsky, Hahn, Scheer, Weig)
- ▶ Fachbereich Chemie (Gruppe Cölfen)
- ▶ Fachbereich Mathematik (Gruppe Junk, Volkwein)
- ▶ Fachbereich Biologie (Gruppe Frickey, Meyer)

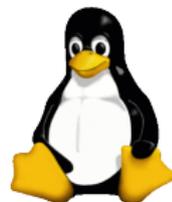
SCCKN (Aktueller Stand) - Hardware

- ▶ ca. 30.9 TFLOPS (SCC: 24.0 TFLOPS, Workstations: 6.3 TFLOPS)
- ▶ 1516 Cores, max. 1.090.000 Core-h/Monat
- ▶ ca. 10.3 TB RAM
- ▶ 120 TB + 120 TB Plattenplatz (Storage + lokal)
- ▶ Infiniband FDR Netzwerk (56 Gbit/s, 0.7 μ s Latenz)
- ▶ 3x10 GE Anbindung Universitätsnetz
- ▶ Inregration ins Netz der Theoretischen Physik



SCCKN (Aktueller Stand) - Software

- ▶ OpenSUSE 12.3 Linux inkl. Repositories
- ▶ Software Modules Umgebung
- ▶ Grid Engine Queuingsystem
- ▶ Ganglia Monitoring
- ▶ Remote Management via IPMI



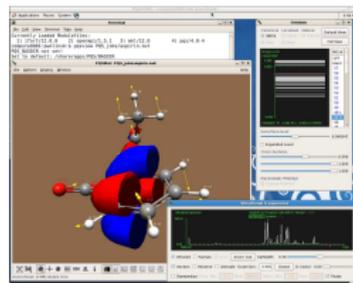
→ Alle Infos, Statistiken und Tutorials auf der Webseite

<http://uni.kn/scc>

Kontakt: scckn@physik.uni-konstanz.de

Frontend-Server:

- ▶ 4 x 8 Core Sandy-Bridge, 512 GB RAM
- ▶ Login-Server (SSH, X2GO)
- ▶ Interaktive Anwendungen (Matlab, Mathematica, VMD, ...)
- ▶ Kompilieren und Testen
- ▶ Zugriff auf Queuingsystem



Storage-Server:

- ▶ 120 TB RAID6
- ▶ NFSv4 Export an alle Knoten und Arbeitsplatzrechner
- ▶ Homeverzeichnisse der Nutzer
- ▶ Arbeitsdaten (/work)



Rechenknoten:

- ▶ 35 Knoten mit 256 GB RAM (Je 2 x Ivy-Bridge E5-2680v2 (2.8 GHz, 20 Core))
- ▶ 16 Knoten mit 64 GB RAM (analog)
- ▶ 2 GPU Knoten (Je 2 x Ivy-Bridge E5-2680v2, NVIDIA Tesla X20m)



Netzwerk:

- ▶ Außenanbindung an Uni LAN mit 10 GE (in N404)
- ▶ Infiniband FDR Vernetzung (Frontend, Storage und Knoten)
- ▶ Management Netz (GE)
- ▶ Remote Management Netz (IPMI)

- ▶ Rechenjob Verwaltung (Annahme, Verteilung, Statistik)
- ▶ Ressourcen Verwaltung (Speicher, Laufzeit, GPU, ...)
- ▶ Fair Scheduling (mit Reservierung)
- ▶ Parallel-Umgebungen für Paralleljobs (OpenMP und MPI)
- ▶ Gruppen-Quota anteilig finanz. Beteiligung (flexible Überbuchung)
- ▶ Starter-Methode setzt OMP_NUM_THREADS und Modules Umgebung

Son of Grid Engine (ehem. SUN Grid Engine)

- ▶ **qsub** - Abschicken von Jobs
- ▶ **qstat** - Jobs Status
- ▶ **qalter, qdel, ...** - Jobs verwalten



Queuingssystem - Nutzung

Queues auf SCC:

scc	1/7 Tage	Default Queue
long	1/30 Tage	Langläufer
longer	1/90 Tage	Extrem Langläufer
pc	1/7 Tage	Arbeitsplatzrechner
nessie,...	30/∞ Tage	Alte Cluster (-cell ...)

Ressourcen:

h_vmem	-l h_vmem=4G	4 GB Speicherlimit (pro Kern!)
h_rt	-l h_rt=48:00:00	2 Tage Laufzeit
infiniband	-l ib	Infiniband Netzwerk
exclusive	-l ex	Exklusive Nutzung der Knoten
cputype	-l p="haswell ivybridge"	CPU Typ
gpu	-l gpu=1	GPU

Default Werte: -l h_vmem=1G,h_rt=24:00:00 -cwd -q all -R y

Modules Environment

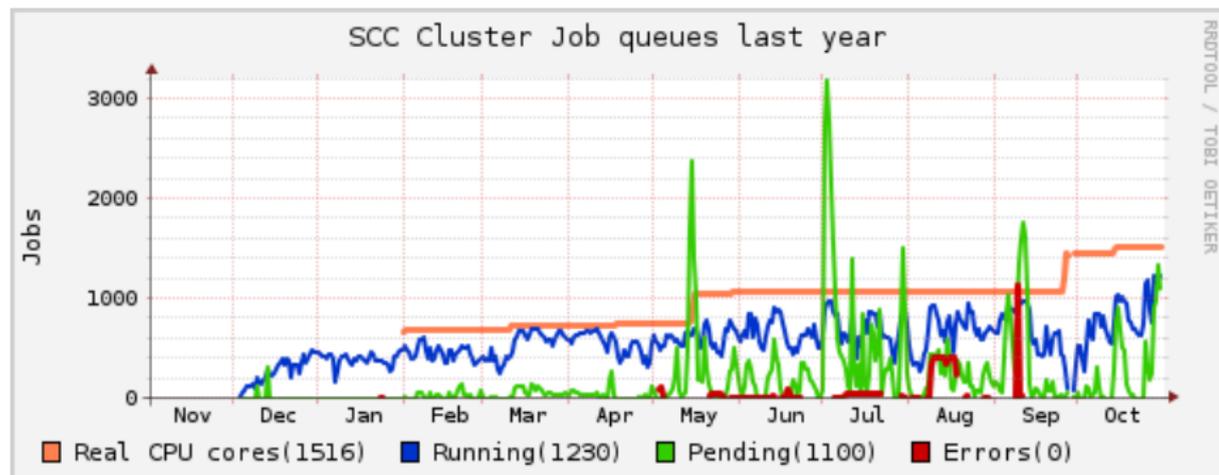
Aktuell **142 verschiedene Software Pakete** als Module
(zusätzlich zu Systeminstallation openSUSE 12.3)

- ▶ 8 Cluster Tools (OpenMPI, DMTCP, MPICH, ...)
- ▶ 17 Compiler & Entwicklung (GNU, Intel, LLVM, ...)
- ▶ 49 Wissenschaftliche Bibliotheken (GSL, MKL, GMP, FFTW, ...)
- ▶ 15 Mathematikprogramme (Matlab, Mathematica, Octave, R, ...)
- ▶ 27 Physik & Chemie Programme (ABINIT, CPMD, GROMACS, LAMMPS, SIESTA, GAUSSIAN, ...)
- ▶ 26 Visualisierung (VMD, MOLDEN, PARAVIEW, POVRAY, ...)

insg. > 800 verschiedene Versionen

- ▶ **module av (gsl)** - Verfügbare Module
- ▶ **module load gsl** - Lade Module (& Abhängigkeiten)

SCC Statistik - Auslastung



Start **SCC**: November 2013

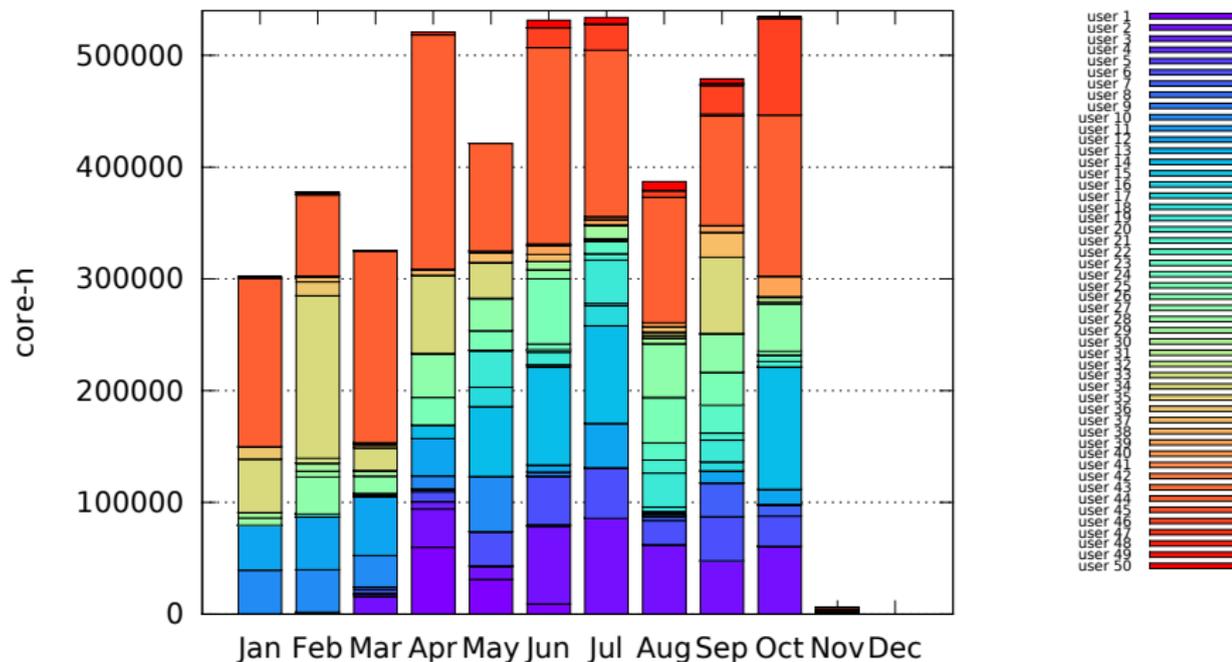
Start **SCCKN**: September 2014

Bis heute: **50 Benutzer**, ca. **145.000 Jobs**

aktuell: ca. 1500 Cores (davon ca. 400 von Arbeitsplatzrechnern)

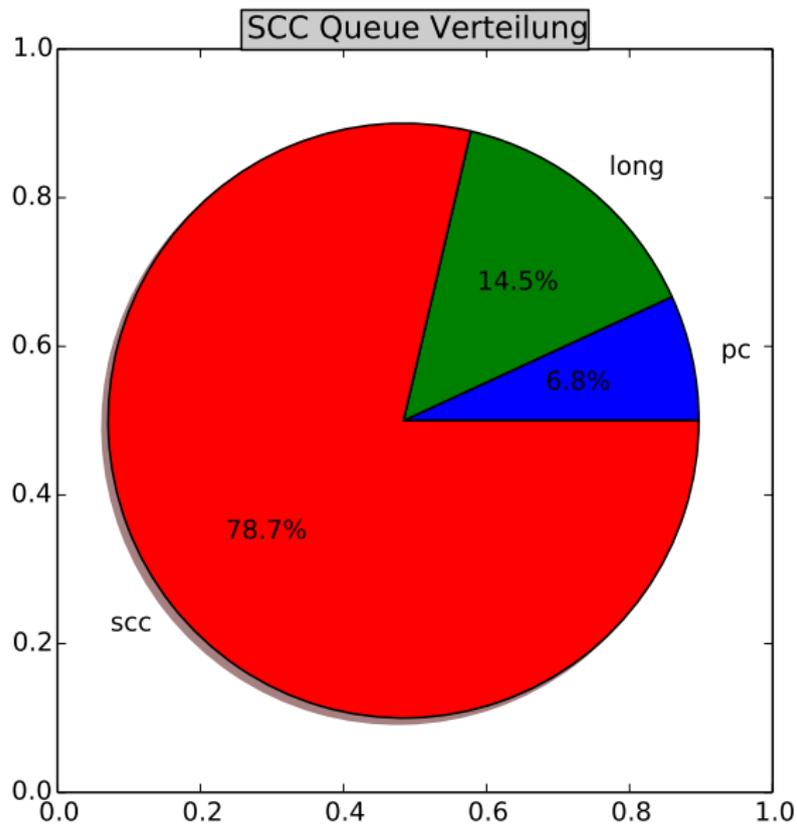
SCC - Nutzer Entwicklung

SCC statistics 2014

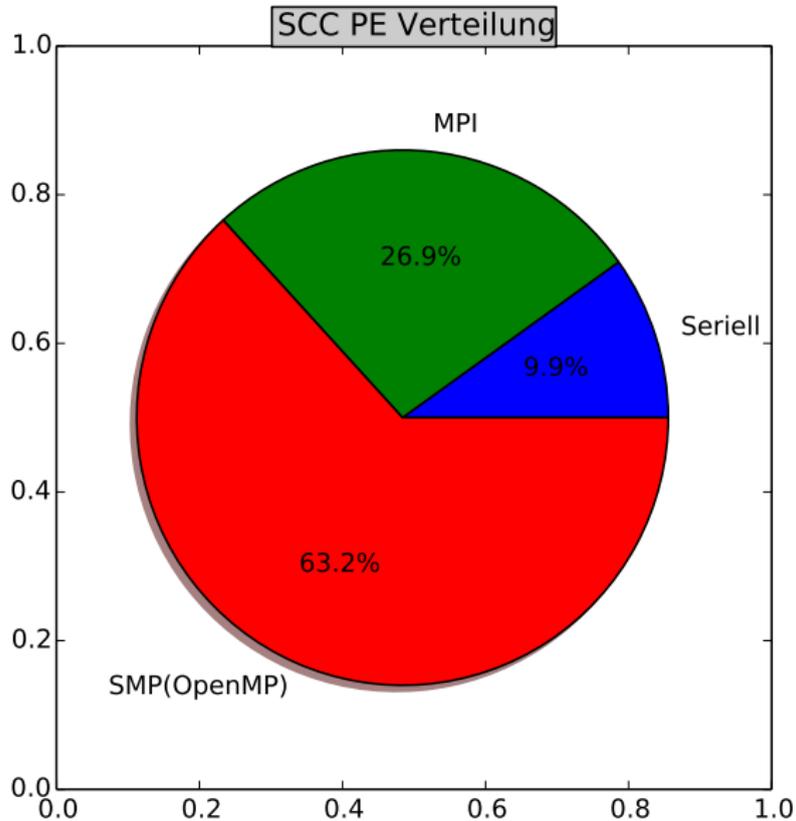


Stand: 1. Nov. 2014

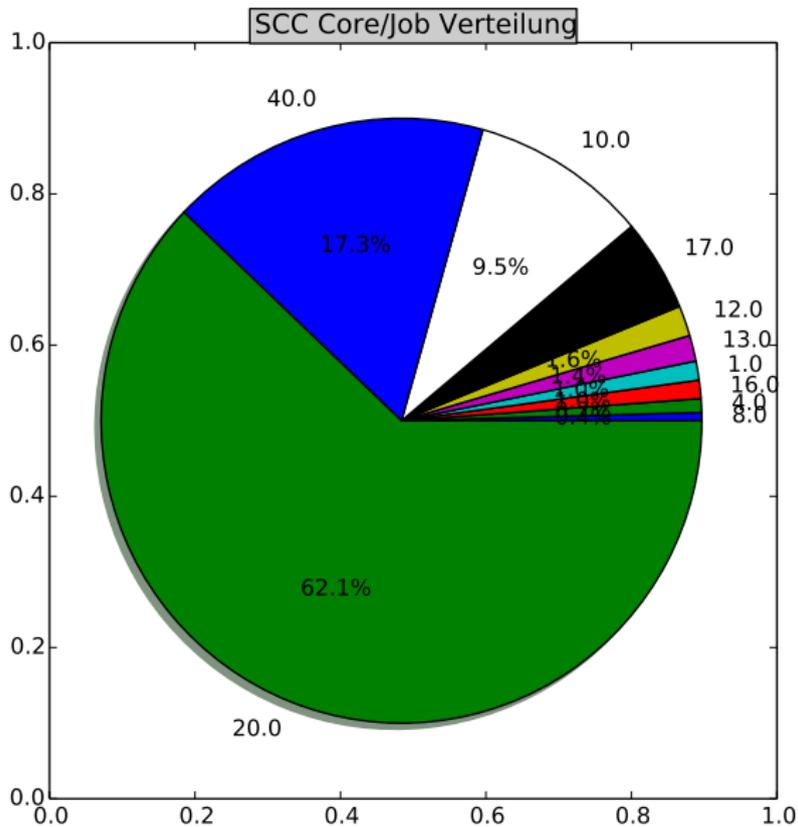
SCC - Queue Statistik



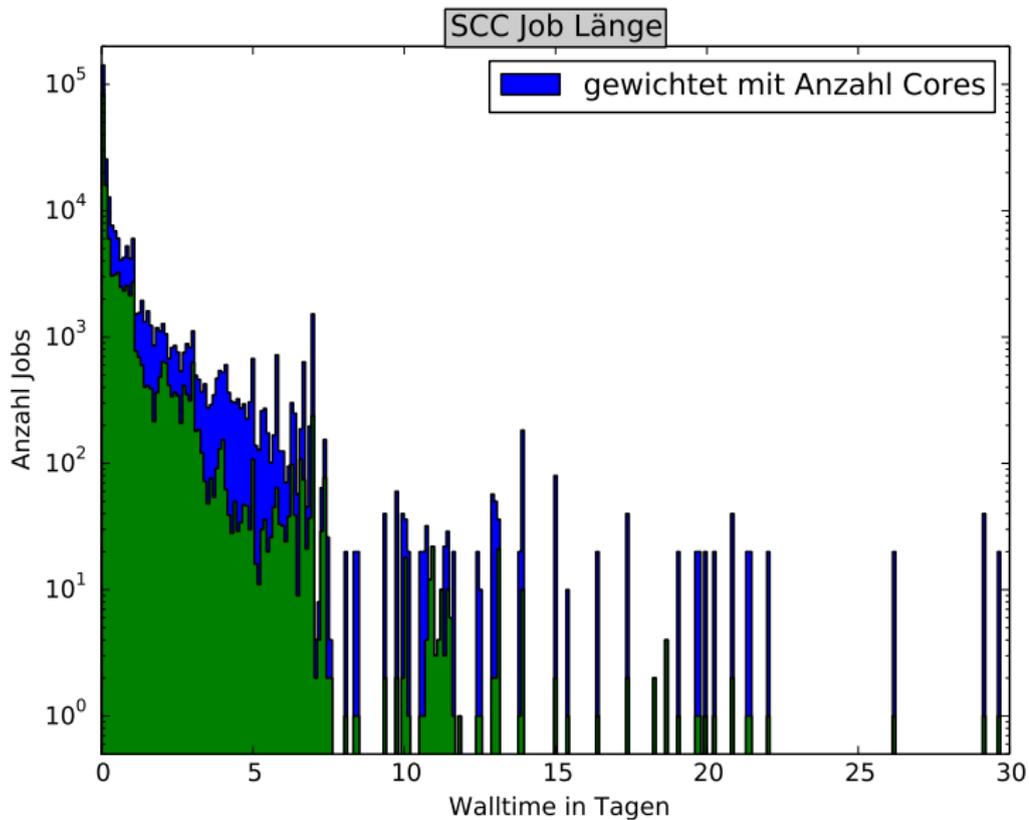
SCC - Parallel Statistik



SCC - Cores/Job Statistik



SCC - Job Längen Statistik



- ▶ November/Dezember 2014: **Einzug in N404**
- ▶ November/Dezember 2014: Logische **Einbindung älterer Cluster** der Theor. Physik
- ▶ Dezember 2014: **Aufstockung mit 8 Knoten** (Haswell EP)



- ▶ **Beteiligung anderer Gruppen** an SCCKN jederzeit möglich
- ▶ **Zunehmender Bedarf**: Erweiterung in 2015 notwendig

Fragen?

