



Alle Inhalte dieser Präsentation stehen unter der Lizenz [Creative Commons BY 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

HOCHLEISTUNGSRECHNEN (HPC)

Dr. Jennifer Buchmüller und
Brigitte Wellenkamp

KENNEN SIE FORSCHUNGSDATEN.INFO?

ÜBER FORSCHUNGSDATEN.INFO

Zentrale deutschsprachige FDM-Informationsplattform

Start Mai 2018

Beteiligung von ca. 30 FDM-ExpertInnen aus Deutschland, Österreich und der Schweiz

21 Partnerinstitutionen

Angebote gegliedert nach

- Themen

- Wissenschaftsbereichen

- FDM im deutschsprachigen Raum

- Praxis kompakt

- Zudem: News und Kalender für Veranstaltungen

Forschung und Daten managen

Willkommen auf der Informationsplattform [forschungsdaten.info](https://www.forschungsdaten.info/)!



Forschungsdaten.info ist das deutschsprachige Informationsportal zu Forschungsdatenmanagement (FDM). Mit praxisnahen Artikeln führt die Seite ins Forschungsdatenmanagement ein. Die Beiträge umfassen dabei die Schritte von der Antragsplanung eines Forschungsprojekts, die Arbeit mit Forschungsdaten im Forschungsalltag, die Umsetzung des Antrags bis hin zur Publikation und der Nachnutzung von Daten. Auch Rechte und Pflichten im Umgang mit Forschungsdaten werden behandelt. Zusätzlich liefern Best-Practice-Beispiele und Informationsmaterial aus den einzelnen Wissenschaftsbereichen Anregungen, um Daten besser (nach-)nutzbar zu machen. Zudem stellen sich auf [forschungsdaten.info](https://www.forschungsdaten.info/) FDM-Initiativen und -Projekte aus dem deutschsprachigen Raum vor. Redaktionell wird die Plattform von einem überregionalen Team von FDM-Spezialistinnen und -Spezialisten betreut.

<https://www.forschungsdaten.info/>

**HABEN SIE SCHON EINMAL AUF EINEM
HOCHLEISTUNGSRECHNER GERECHNET?**

Forschungsdaten.info Hochleistungsrechnen (HPC)



Scientific Computing and Simulation am SCC



Abteilungsleitung Dr. Jennifer Buchmüller

Betrieb der Tier-3 und Tier-2 HPC Systeme des KIT.

Optimale Umgebung und Unterstützung für die Entwicklung neuer wissenschaftlicher Software.

Beschleunigung von Entwicklungsprozessen und Portierungsvorhaben bereits bestehender wissenschaftlicher Anwendungen.



Schwerpunkte

Anwendungen und Betrieb

- Erdsystemwissenschaften, Materialwissenschaften, Strömungsdynamik, Elementar-/Astroteilchenphysik
- AAI und Security
- I/O und Speichersysteme

Methoden

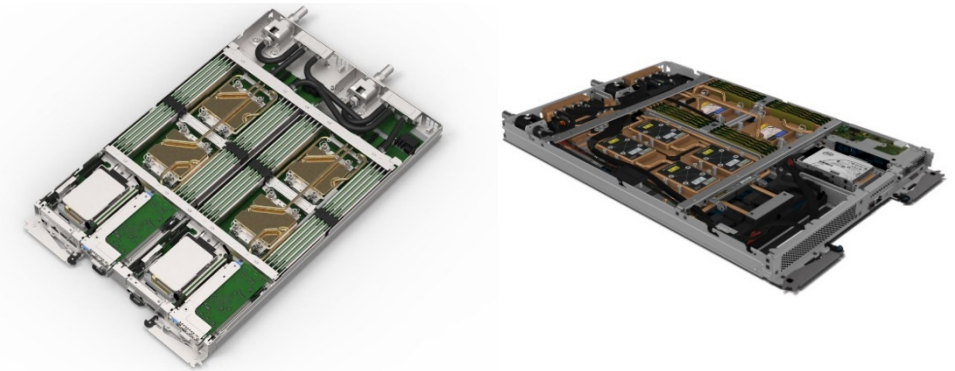
- Math. Softwarebibliotheken
- Datenintensives Rechnen
- Nachhaltige Software-Entwicklung



- Budget: 15 Million Euro
- In Betrieb seit Mitte März 2021
- Erwartete Peak-Performance: 17 PFlops
- Fast 60.000 Intel Ice Lake Cores
- Mehr als 660 NVIDIA-GPUs



- 750 kW Warmwasser-Chipkühlung mit Nachnutzung



	Lenovo SD650 v2	Lenovo SD650-N v2
# Nodes	570 + 32	167
CPUs	2x Intel „Ice Lake“	2x Intel „Ice Lake“
Memory	256/512 GB	512 GB
GPUs		4x NVIDIA A100
Interconnect	InfiniBand HDR (200 Gbit/s)	

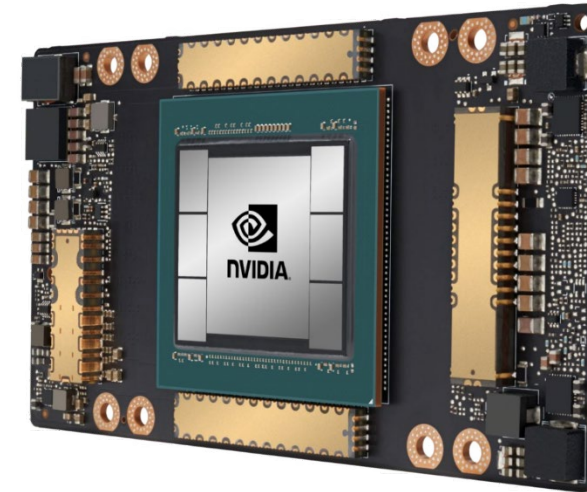
Neue Architekturen – CPU vs. GPU



Intel Ice Lake Xeon

10nm+, <<100 Cores, 8x DDR4

Auf „General Purpose“ optimiert
Mäßige Gleitkommaleistung
Großer Hauptspeicher mit mittlerem Durchsatz
Externer Interconnect (InfiniBand)



NVIDIA Volta A100

7nm, 6912 Cores, 6x HBM2

Auf hohe Rechenleistung optimiert
Hohe Gleitkommaleistung
Kleiner, schneller Hauptspeicher
Interne NVLink-Ports für Multi-GPU

Neue Architekturen – Neue Herausforderungen

- CPU vs. GPU:
SIMD (Single Instruction Multiple Data) vs.
SMT (Single Instruction Multiple Threads)
- Hybrid-Lösung CPU-GPU erfordert Kompromissfindung
im Speicherlayout. Hohe Diskrepanz zwischen typischen
CPU Zyklen und Speicherzugriff
- Heterogenität der Nutzer und Entwickler
- Portabilität von Modellcode ist nicht grundsätzlich
gewährleistet



Zusammenspiel Wissenschaft und Hardware

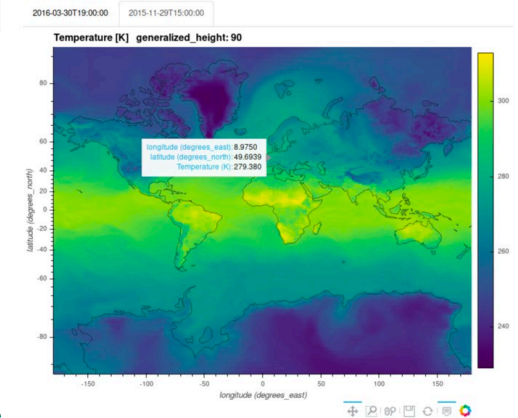
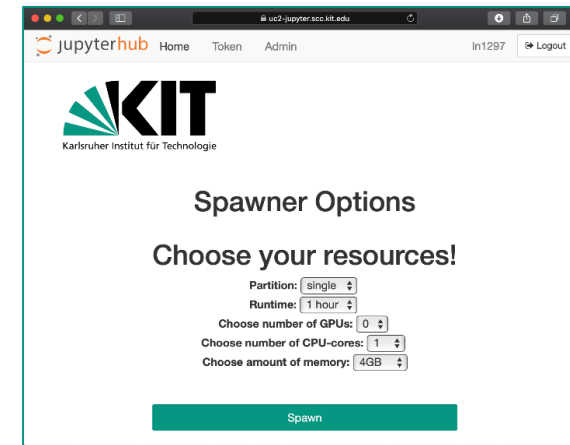
Orchestration Server - Neue Zugangswege

Interaktives Hochleistungsrechnen: Jupyter

- Nutzer können seit August 2020 auf beiden Systemen (Tier-3 und Tier-2) Jupyter Notebooks verwenden
- Ausgelegt auf KI/ML Community

Datenzugriff und Automatisierung

- Einfacher Zugriff mittels Backend-Serverlösungen
- Schneller Überblick über große Datensätze
- Zentraler Einsatz von Workflowmanagern



#	Variable name	Variable dimensions
31	Vertical velocity	time, generalized_height, latitude, longitude
32	TRCl _y _pass_chemtr_mixing_ratio	time, generalized_height, latitude, longitude
33	TRO ₃ _chemtr_mixing_ratio	time, generalized_height, latitude, longitude
34	Specific humidity	time, generalized_height, latitude, longitude
35	Temperature	time, generalized_height, latitude, longitude
36	TRH ₂ O_chemtr_mixing_ratio	time, generalized_height, latitude, longitude
37	Vorticity	time, generalized_height, latitude, longitude
38	TR_slt_mixing_ratio	time, generalized_height, latitude, longitude
39	sea surface temperature	time, latitude, longitude
40	Pressure	time, generalized_height, latitude, longitude
41	total_specific_cloud_ice_content_(diagnostic)	time, generalized_height, latitude, longitude
42	TR_cold_chemtr_mixing_ratio	time, generalized_height, latitude, longitude
43	TRN ₂ O_chemtr_mixing_ratio	time, generalized_height, latitude, longitude

Plot variable over 'lon'x'lat' (this may take some time)

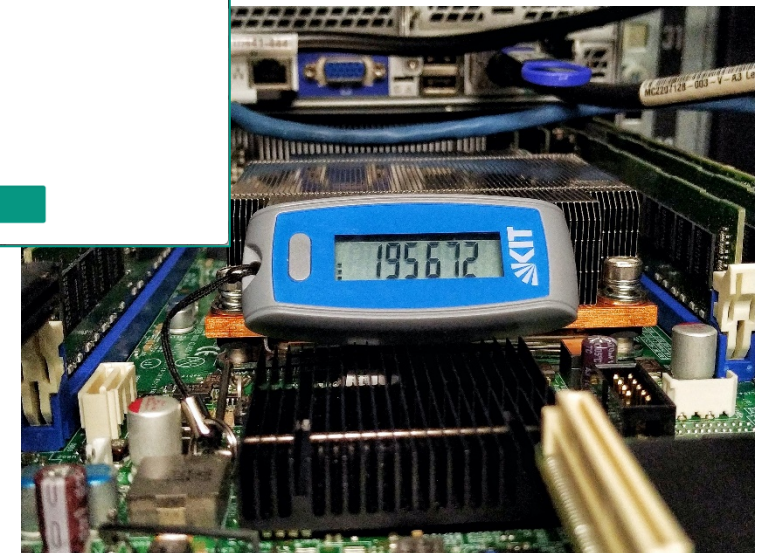
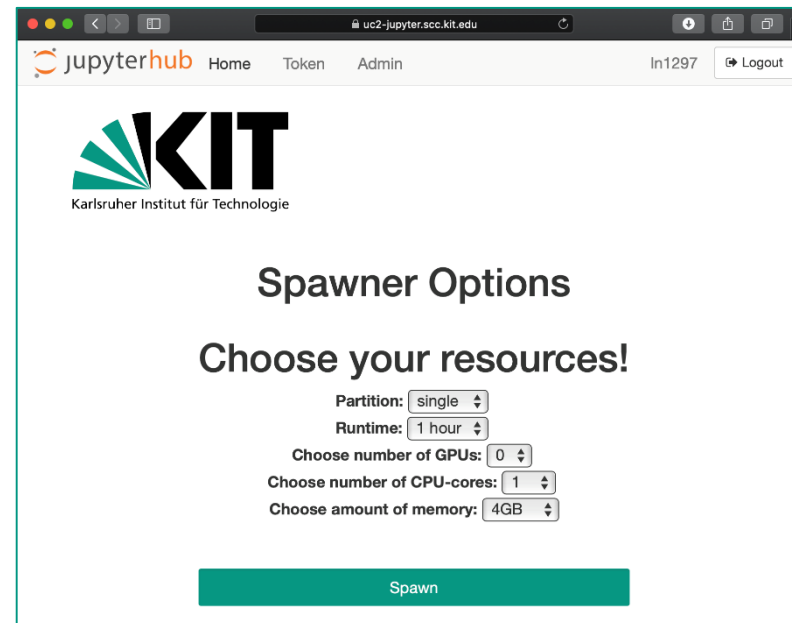
Start date	End date
Sun Nov 29 2015	Thu Mar 31 2016

December 2015		Date						
Sun	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Sat	IT-chem...	2016-03-31T00:00:00
		1	2	3	4	5	IT-chem...	2016-03-31T01:00:00
6	7	8	9	10	11	12	IT-chem...	2016-03-30T22:00:00
13	14	15	16	17	18	19	IT-chem...	2016-03-30T21:00:00
20	21	22	23	24	25	26	IT-chem...	2016-03-30T23:00:00
27	28	29	30	31			IT-chem...	2016-03-30T20:00:00
6	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T19:00:00
7	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T18:00:00
8	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T16:00:00
9	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T17:00:00
10	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T15:00:00
11	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T13:00:00
12	polstracc0new/2016033000/2016033000-ART-chem...							2016-03-30T14:00:00

Beschleuniger Technologie trifft auf AI

Interactive supercomputing - Jupyter

- Erstellung von Jupyter- und Python-Notebooks auf den HPC-Systemen des KIT.
- Priorisierter Zugriff auf NVIDIA GPU V100 und A100 über eine spezielle Queue.



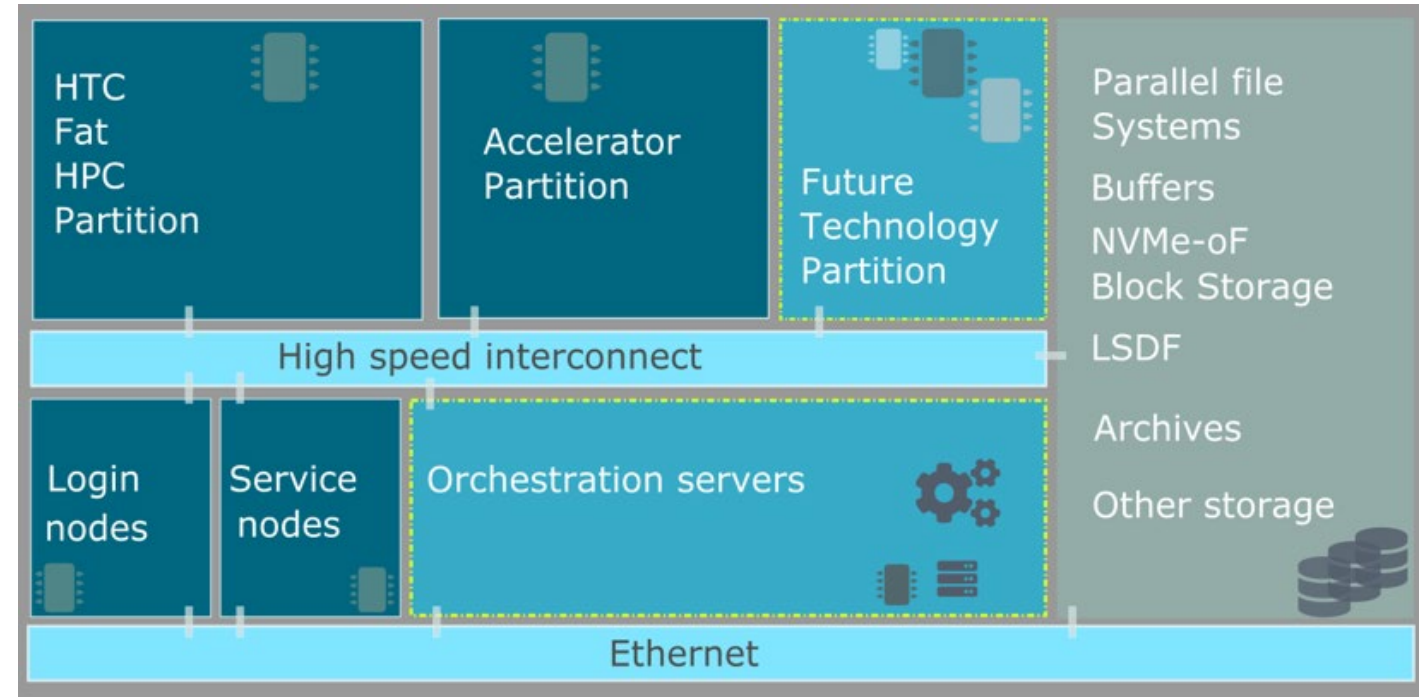
Jupyter

- JupyterLab baut eine ssh-Verbindung auf, öffnet ein Dashboard und verwendet ein Web-Frontend für den Benutzenden in einem Browser
- Klassischer Workflow: Vier einzelne, sequentielle Schritte
- JupyterLab - Alles an einem Ort:
 - ssh Verbindung
 - Text Editor
 - Job scheduling
 - Ergebnisbetrachtung



HoreKa - Future Technologies Partition

- Effektive Unterstützung wissenschaftlicher Software-Entwicklung
- Zielgerichtete Hardware-Portierung
- Beschleunigung der Entwicklungszyklen
- Entwicklung effizienter Algorithmen, Bibliotheken und Anwendungen
- Künftige Erweiterungen durch Vektorkarten, POWER10, FPGAs, Embedded FPGAs, ...



FUJITSU

8x ARM (HPE Apollo 80):

AMD

Milan / Rome + MI 100

Orchestration Server – CI/CT/CD

Qualitätskontrolle: Neue Architekturen erfordern Restrukturierung von Programmcode - Ergebnis darf sich aber nicht verändern.

Zusammenspiel Hardware - Bibliotheken - Anwendung ist sensibel. Continuous Integration/Testing/Deployment (CI/CT/CD) hilft hier schnell und einfach mögliche Fehlerquellen zu eliminieren.

Generalisierte/Standardisierte Testumgebung ermöglicht schnelles und konsequentes Benchmarking.

Challenges on HPC systems



Dynamic HPC Ressourcen an Stelle von dedizierten CI/CD/CT-Cluster



„**User Experience**“ sollte auf einem HPC System ähnlich sein wie auf kleineren Systemen



Kurze turn-around times notwendig



Viele CI/CT/CD Nutzende erwarten **Docker** Containers oder root-Rechte



HoreKa

KIT
Karlsruhe Institute of Technology

HoreKa

KIT
Karlsruhe Institute of Technology



reKa

Outlook

- **HoreKa:** Übergabe an die Wissenschaft – 01.06.21.
- **User support:** CI/CD/CT als Service für alle nationalen Hochschulen über NHR
- **Future Technologies Partition:** Weiterer Ausbau u.a. vector cards, POWER10 processors, FPGAs, embedded FPGAs, ...
- **NHR:** Stellenausschreibungen

3814/2021: <https://www.pse.kit.edu/karriere/joboffer.php?id=85844&language=de>
1038/2021: <https://www.pse.kit.edu/karriere/joboffer.php?id=85842&language=de>
1040/2021: <https://www.pse.kit.edu/karriere/joboffer.php?id=85846&language=de>
1041/2021: <https://www.pse.kit.edu/karriere/joboffer.php?id=85848&language=de>



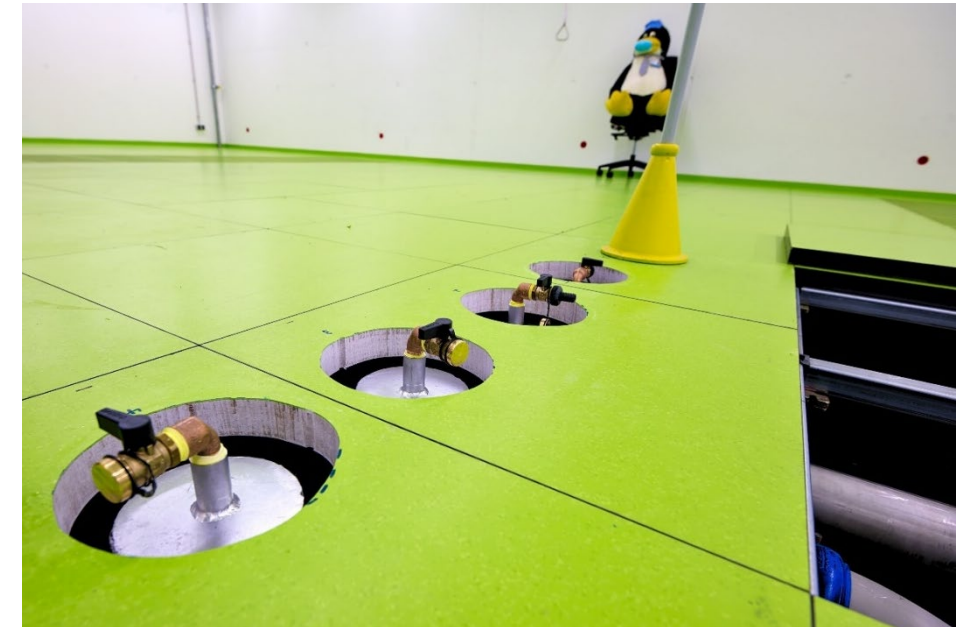
Mehr Informationen und Support



jennifer.buchmueller@kit.edu



<https://nhr.kit.edu/userdocs/horeka/>
<https://nhr.kit.edu/userdocs/ci/>



TECHNISCHE INFRASTRUKTUREN

Themen	Wissenschaftsbereiche	FDM im deutschsprachigen Raum	Praxis kompakt	Kontakt	DE	🔍
Baden-Württemberg		Bayern		Brandenburg		
Hamburg		Hessen		Niedersachsen		
Nordrhein-Westfalen		Sachsen		Thüringen		
Österreich		Schweiz		NFDI - Nationale Forschungsdateninfrastruktur		

E-Science in Baden-Württemberg

- FDM-Projekte in Baden-Württemberg +
- VFU-Projekte in Baden-Württemberg +
- Arbeitskreis Forschungsdatenmanagement
- Technische Infrastrukturen +
- Schulungsangebote
- E-Science-Tage



unter neuen
 Baden-Württemberg eine
 nmen des Konzeptes wurden
nt, Lizenzierung, **Open Access**
 itäten in mehreren, vom
 ch verteilen und

starken
 iewerkzeuge und Dienstee-
insdaten und die

Science Data Center	+
FDM-Projekte in Baden-Württemberg	+
VFU-Projekte in Baden-Württemberg	+
Arbeitskreis Forschungsdatenmanagement	
Technische Infrastrukturen	-
bwCloud Scope	
bwDataArchive	
bwHPC	
bwSync&Share	
SDS@hd - Science Data Storage	
Schulungsangebote	
E-Science-Tage	

Technische Infrastrukturen

Speicher- und Rechendienste in Baden-Württemberg

Für das Rechnen und für die Speicherung von Forschungsdaten stehen Forschenden in Baden-Württemberg verschiedene Dienste zur Verfügung. Sie unterscheiden sich in Verfügbarkeit, Ausstattung und Preis. Eine individuelle Beratung mit der Forschungsdatenreferentin bzw. dem Forschungsdatenreferenten an Ihrer Hochschule empfehlen wir Ihnen daher.



bwHPC
Hochleistungs-
rechnen



bwSync & Share
 Teilen und Speichern

SDS@HD
Speicherdienst für
HotData

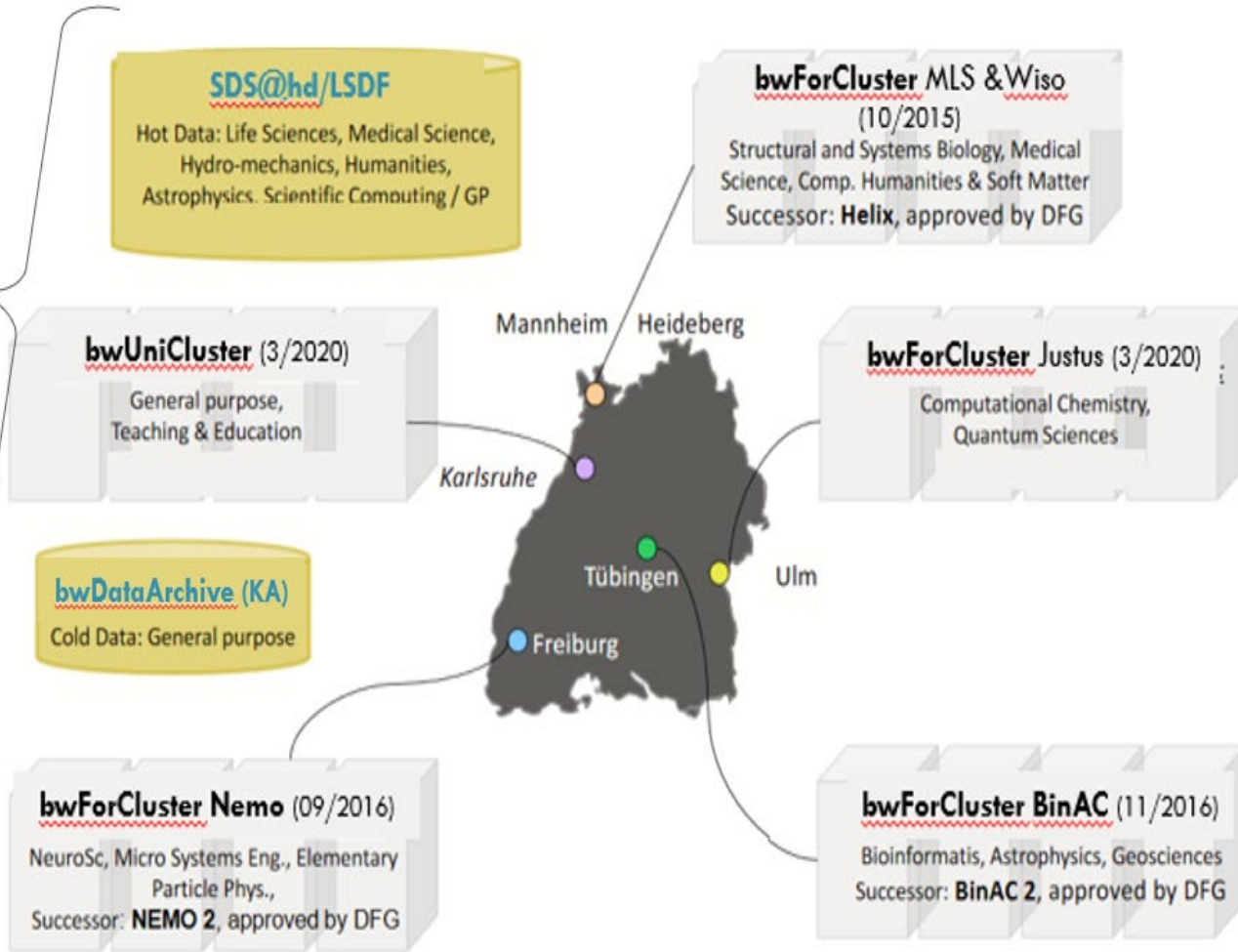


bwData-Archive
 Langfristige Speicherung

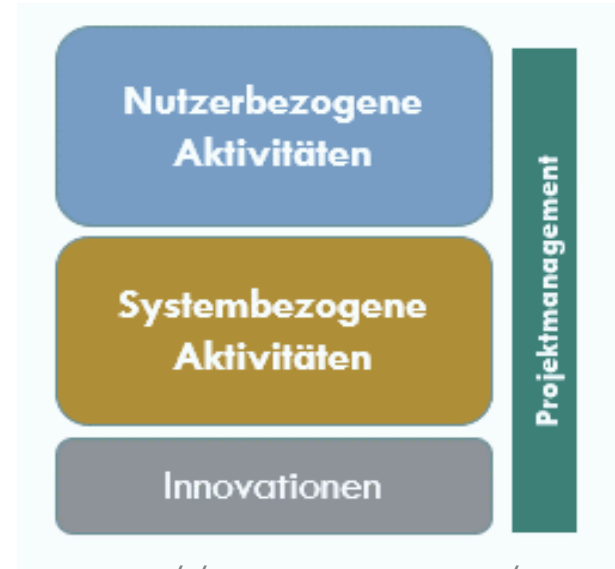
bwCloud Scope



bwHPC-S5 Scientific Simulation and Storage Support Services



- **Breiter Anwenderkreis**
- **Einfacher, sicherer Zugang**
- **Einfacher Wechsel**



<https://www.bwhpc.de/>

Baden-Württemberg Support-Portal for:

ForHLR bwUniCluster bwDataArchive
 bwForCluster bwSync&Share bwCloud

[Home](#) [Submit ticket](#) [Search ticket](#) [Support staff](#) [My data](#) [Contact](#)

Submit ticket

User information

Name: * E-Mail:

Notification mode ?
 on every change
 on solution

* My support unit: ?

Issue information

* Subject ?

* Describe the issue ?

4000 characters left

* Priority: ?

* Assign ticket to (please note) ?

Attach File(s) (max. 2 MB pro File)

Keine Datei ausgewählt.
 Keine Datei ausgewählt.

Keine Datei ausgewählt.
 Keine Datei ausgewählt.

* Required fields

- Service Desk Uni Tübingen

Service Desk Uni Tübingen (bwHPC)

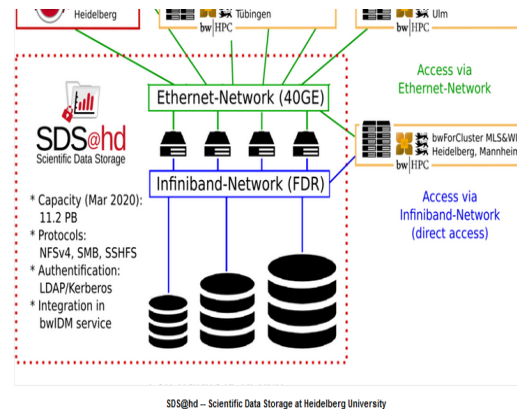
Service Desk Uni Ulm

Service Desk Uni Ulm (bwHPC)
- Second Level**
- bwHPC Competence Center Support for:**
- Bioinformatics and Astrophysics
 - Computational Chemistry and Quantum Sciences
 - Engineering
 - Geoscience
 - Global System Sciences
- bwTools**
- bwSupport Portal
 - bwSync&Share
 - Cluster-Information-Syst
 - Monitoring Portal



bwHPC – WIKI

- Übersicht über vorhandene bwHPC u. bwSpeichersysteme
- Technische Dokumentation
- Nutzeranleitung, Beispiele
- Best Practice Repository

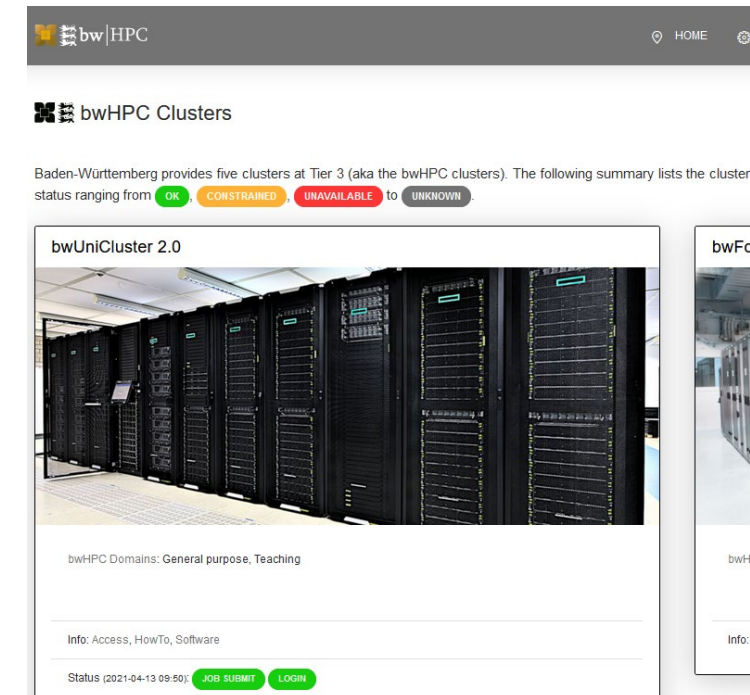


Access <ul style="list-style-type: none"> • SDS@hd User Access and SDS@hd registration • SDS@hd bwForCluster Access 	Protocols <ul style="list-style-type: none"> • SFTP/SSHFS (Win,Mac,Linux) • SMB/CIFS (Win,Mac,Linux) • NFSv4 (Linux)
Documentation <ul style="list-style-type: none"> • SDS@hd web site 	Snapshots/Backup <ul style="list-style-type: none"> • Snapshots (for data retrieving and restoring)
Support <ul style="list-style-type: none"> • Ticket system 	Acknowledgement

https://wiki.bwhpc.de/e/Main_Page

Webseite bwHPC.de

- Statusanzeige der HPC
- Softwareübersicht
- Publikationen, Tigerteams
- Zentrale Antragsseite (ZAS)



<https://www.bwhpc.de/>

bwHPC – Trainingsplattform

- Übersichten Termine verschiedener Level
- E-Learning Module
- Webinare, fachspezifisch

Übersicht Kurse und Webseminare

Niveau	Thema	Titel	Kursbeginn ↑	Kursende	Ort	Kursinfo
Advanced course	Programming	ONLINE COURSE: Fortran for Scientific Computing	12.04.2021	16.04.2021	Uni Stuttgart	hirs.de/training/2021-04-12-ftn1/
Advanced course	Programming	ONLINE COURSE: Modern C++ Software Design (Advanced)	04.05.2021	07.05.2021	Uni Stuttgart	hirs.de/training/2021-05-04-cpp2/
Advanced course	Machine Learning	ONLINE COURSE: From Machine Learning to Deep Learning: a concise introduction	17.05.2021	19.05.2021	Uni Stuttgart	hirs.de/training/2021-05-17-d3/

TigerTeams (Expertenpools)

- Universitätsübergreifend
- Zentral beantragbar
- Kleine Teams v. IT-Spezialisten+Forschenden
- Kurzer Inhalt, Beteiligte auf Webseite

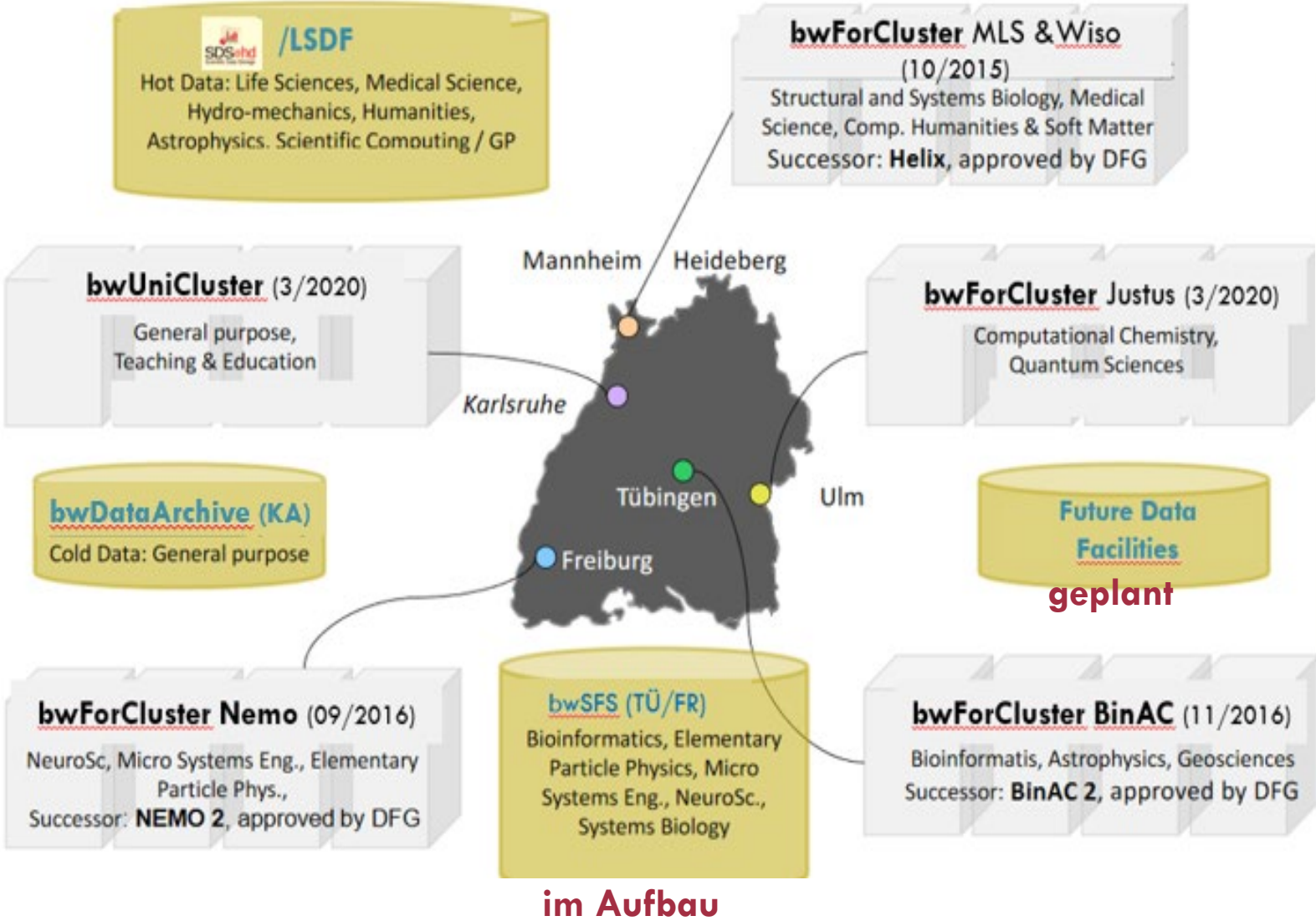


bwHPC
High Performance Computing,
Data Intensive Computing and
Large Scale Scientific Data Management
in Baden-Württemberg

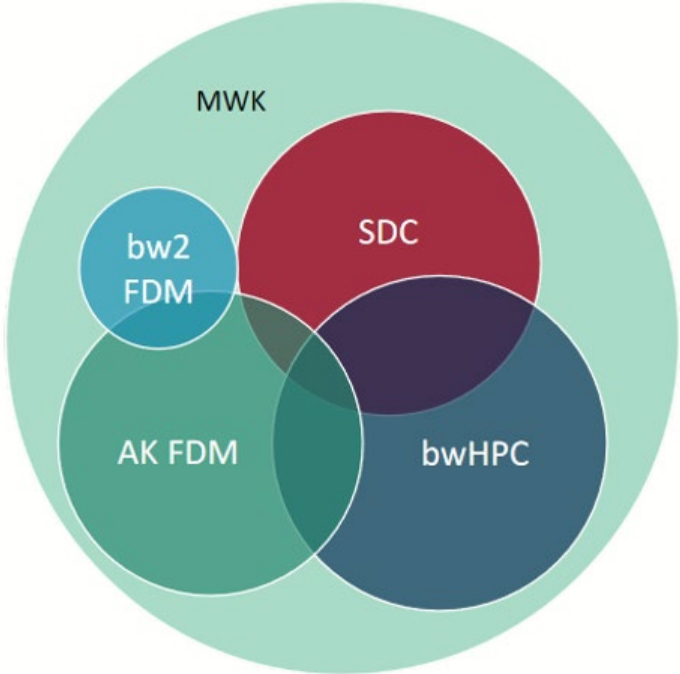
The primary goal is the establishment of an integrated state computing and data infrastructure as well as the increase of efficiency the effectiveness through first-class support of scientists and users

https://www.bwhpc.de/courses_a_tutorials.php

bwHPC- und StorageSysteme



Vernetzung



Dr. Alexandra Axtmann & Dr. Elisabeth Böker

Herzlichen Dank für Ihre Aufmerksamkeit !

Brigitte Wellenkamp

Universität Hohenheim  UNIVERSITÄT
HOHENHEIM
KIM Kommunikations-, Informations- und Medienzentrum (630)

 www.bwHPC.de

 office@bwHPC.de

Projektleitung:

Steinbuch Centre for Computing

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Kommunikations- und Informationszentrum (kiz)

Universität Ulm



Informationsangebote



**Forschungsdaten.info
aktuell**

Newsletter der Redaktion:

[https://www.forschungsdaten.info/
kontakt/forschungsdateninfo-
aktuell/](https://www.forschungsdaten.info/kontakt/forschungsdateninfo-aktuell/)

Informationsangebote

Twitteraccount @ForschDatenInfo



forschungsdaten.info

[Profil bearbeiten](#)

forschungsdaten.info
@ForschDatenInfo

Informationsplattform zu Forschungsdatenmanagement

📍 Baden-Württemberg [forschungsdaten.info](#)
📅 Seit November 2013 bei Twitter

258 Folge ich 606 Follower



Postkarten



VIELEN DANK!

elisabeth.boeker@uni.kn
kontakt@forschungsdaten.info
forschungsdaten.info

WIR FREUEN UNS AUF DIE DISKUSSION

Dr. Jennifer Buchmüller,
Brigitte Wellenkamp &
Dr. Elisabeth Böker





BETEILIGTE & FÖRDERER

Gefördert durch:



Baden-Württemberg

MINISTERIUM FÜR WISSENSCHAFT, FORSCHUNG UND KUNST