

HPC working seminar for physicists

Scientific Computing Department at HIM

Dr. Dalibor Djukanovic

Dr. Peter-Bernd Otte

bi-weekly meeting – 4.11.2021



Today's Topics

1. news
 2. Srijit Paul (Lattice group): Overview of the GPUs on Mogon 2 with relevant modules for an effective workflow.
 3. info on how to gain access to GPU nodes.
 4. your questions / discussion / requests to the maintainers
- compact in time (15mins + user questions/discussion).
 - bring people together tackling the same problems

News

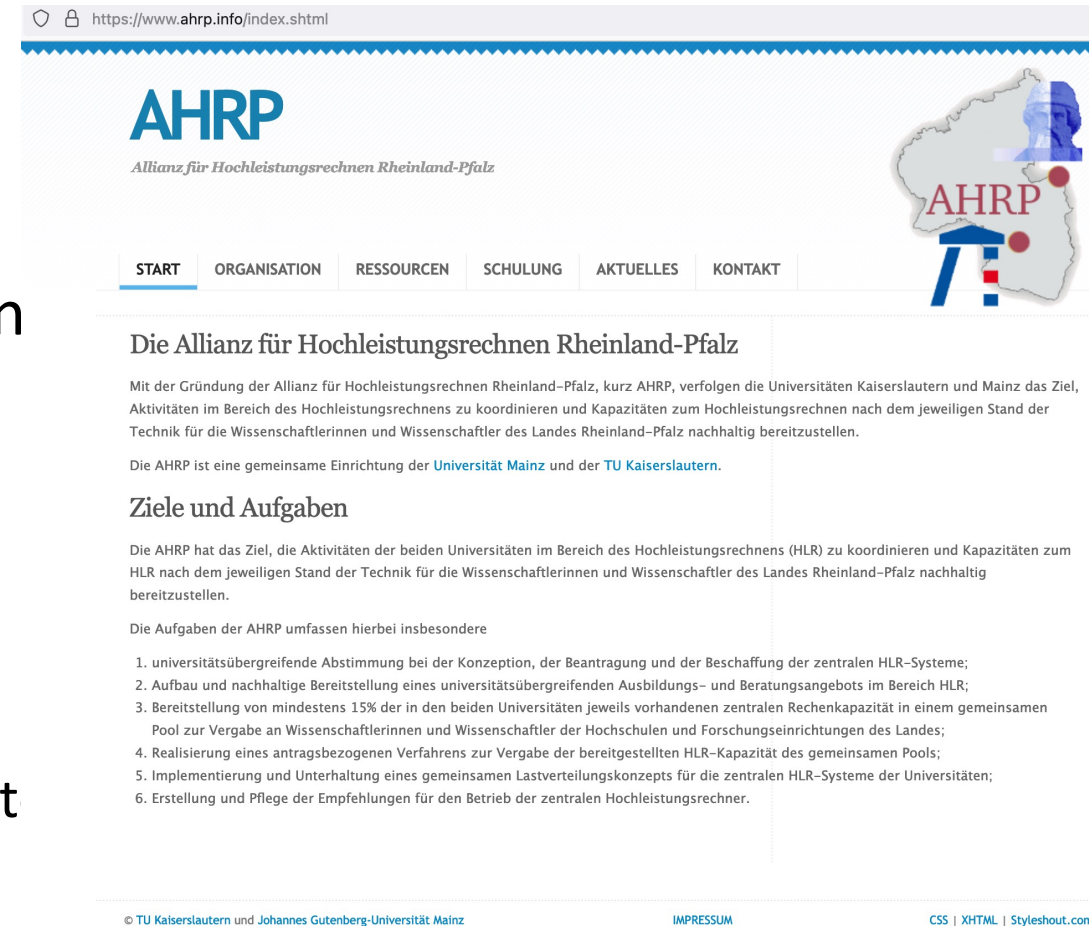
- Minutes:
<https://www.hi-mainz.de/research/computing/hpc-working-seminar/>
- Currently checking a problem with overflowing /tmp directory when using multiple singularity jobs in parallel. Fix should be available in some days.

2.11. maintenance day:

- improved security
- ~20 nodes fixed
- minor changes: some modules deprecated

Apply for GPU nodes

- GPU nodes only available on Mogon2, belong to University
- <https://www.ahrp.info/>
 - → Ressourcen
 - Antrag auf Nutzung eines rheinland-pfälzischen Hochleistungsrechners
 - (ENGLISH VERSION: Application for Using a Rhineland-Palatinate High Performance Comput
- Fill out application, together with 1-2 sides of project description
- Technical contact person: fill in my name (but contact me first)



The screenshot shows the homepage of the AHRP website. The browser address bar displays <https://www.ahrp.info/index.shtml>. The page features a blue header with the AHRP logo and the tagline "Allianz für Hochleistungsrechnen Rheinland-Pfalz". A navigation menu includes links for START, ORGANISATION, RESSOURCEN, SCHULUNG, AKTUELLES, and KONTAKT. The main content area is titled "Die Allianz für Hochleistungsrechnen Rheinland-Pfalz" and contains introductory text, a list of goals and tasks, and contact information. The footer includes copyright information for TU Kaiserslautern and Johannes Gutenberg-Universität Mainz, along with links to IMPRESSUM, CSS, XHTML, and Styleshout.com.

<https://www.ahrp.info/index.shtml>

AHRP

Allianz für Hochleistungsrechnen Rheinland-Pfalz

[START](#) [ORGANISATION](#) [RESSOURCEN](#) [SCHULUNG](#) [AKTUELLES](#) [KONTAKT](#)

Die Allianz für Hochleistungsrechnen Rheinland-Pfalz

Mit der Gründung der Allianz für Hochleistungsrechnen Rheinland-Pfalz, kurz AHRP, verfolgen die Universitäten Kaiserslautern und Mainz das Ziel, Aktivitäten im Bereich des Hochleistungsrechnens zu koordinieren und Kapazitäten zum Hochleistungsrechnen nach dem jeweiligen Stand der Technik für die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des Landes Rheinland-Pfalz nachhaltig bereitzustellen.

Die AHRP ist eine gemeinsame Einrichtung der [Universität Mainz](#) und der [TU Kaiserslautern](#).

Ziele und Aufgaben

Die AHRP hat das Ziel, die Aktivitäten der beiden Universitäten im Bereich des Hochleistungsrechnens (HLR) zu koordinieren und Kapazitäten zum HLR nach dem jeweiligen Stand der Technik für die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des Landes Rheinland-Pfalz nachhaltig bereitzustellen.

Die Aufgaben der AHRP umfassen hierbei insbesondere

1. universitätsübergreifende Abstimmung bei der Konzeption, der Beantragung und der Beschaffung der zentralen HLR-Systeme;
2. Aufbau und nachhaltige Bereitstellung eines universitätsübergreifenden Ausbildungs- und Beratungsangebots im Bereich HLR;
3. Bereitstellung von mindestens 15% der in den beiden Universitäten jeweils vorhandenen zentralen Rechenkapazität in einem gemeinsamen Pool zur Vergabe an Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Hochschulen und Forschungseinrichtungen des Landes;
4. Realisierung eines antragsbezogenen Verfahrens zur Vergabe der bereitgestellten HLR-Kapazität des gemeinsamen Pools;
5. Implementierung und Unterhaltung eines gemeinsamen Lastverteilungskonzepts für die zentralen HLR-Systeme der Universitäten;
6. Erstellung und Pflege der Empfehlungen für den Betrieb der zentralen Hochleistungsrechner.

© TU Kaiserslautern und Johannes Gutenberg-Universität Mainz [IMPRESSUM](#) [CSS](#) | [XHTML](#) | [Styleshout.com](#)

Open questions 1/2

3. Information on the expected use of resources

Selection of the high-performance computer *

- Elwetritsch (Tier 3 - TUK)
- Mogon II (Tier 2 - JGU)

Usage period (format: DD.MM.YYYY-DD.MM.YYYY) *

Expected type of use *

- Single processor applications
- SMP applications
- MPI applications
- GPGPU applications
- KNL applications
- DGX applications

Planned CPU usage in usage units (NE) per month *

- XS (up to 5 NE) - trial project on tier 3 only
- S (up to 30 NE)
- M (up to 100 NE)
- L (up to 500 NE)
- XL (starting at 500 NE) - large project on tier 2 only

- Select Mogon 2
- SMP = Shared Memory Program
- MPI = MPI-Program
- GPU
- KNL = Special Intel Architecture
- DGX = Special NVidia Architecture
- Ideal: S project,
often only 1 week processing time

Open questions 2/2

3. Information on the expected use of resources

Selection of the high-performance computer *

- Elwetritsch (Tier 3 - TUK)
- Mogon II (Tier 2 - JGU)

Usage period (format: DD.MM.YYYY-DD.MM.YYYY) *

Expected type of use *

- Single processor applications
- SMP applications
- MPI applications
- GPGPU applications
- KNL applications
- DGX applications

Planned CPU usage in usage units (NE) per month *

- XS (up to 5 NE) - trial project on tier 3 only
- S (up to 30 NE)
- M (up to 100 NE)
- L (up to 500 NE)
- XL (starting at 500 NE) - large project on tier 2 only

- NE = “Nutzungseinheit” [kCPUhours/month]
- 1NE = 1CPU-hour /month /1000

- Example estimation for number of CPU hours:
 - $8 \text{ Cores} * 12 \text{ Hours/Job} * 2 \text{ Jobs/Day} * 5 \text{ Days/Week} * 4 \text{ Weeks/Month} = 3840 \text{ Core*Hours/Month}$

- Estimation in NE (CPU-Hours / Month / 1000)
 - $NE = 3840 \text{ Core*Hours}/1000 = 3.84$

Hot Topics we are working on

- Singularity containers for analysis (BES, Panda)
- Lustre mount GSI <-> HIM via T-Bit Link
 - Test IP-connection with 10Gbit/s
 - Lustre mount on special head nodes
 - Mapping for both directions
 - user and group mapping
 - Next: speed tests
- visualisation of usage statistics via Elastic Search
 - together with ZDV

Your requests

- Problematic file transfer between data centers (Jülich, GSI, Mainz)
→ in the pipeline
- What else needs improvement?

Next

- Next meeting on 9.11.
- Planning ahead:
 - Not all groups had a presentation yet.
 - detailed presentation of algorithms
- hand in your topics!

Present your work group

work group title	
working on:	detector simulation / data analysis / ...
picture	
all involved:	<ul style="list-style-type: none">• names• project headline• technique (group internal analysis framework / python scripts / fancy algorithms / ...)