

HPC an der Universität Augsburg

Ralf Utermann, MNTF, Institut für Physik



zentrale und zentral unterstützte Systeme

1998

IBM RS/6000 SP im Rechenzentrum, in Betrieb bis 2006

2007

Kooperationsvereinbarung zwischen den Fakultäten MNTF (Physik) und FAI (Geographie) zum Betrieb eines Linux Rechenclusters im Rahmen einer ITS Servicegruppe Compute.

- ca. 80 Rechenknoten von X5670 (2x6C, 48GB) bis Skylake-SP 8160 (2x24C, 576GB) in zwei wassergekühlten Racks
- GPFS mit 3 NSD-Servern, FC direkt an 3 Speichersystemen (DS35, E2760 mit ca. 200 SAS disks 1-4TB), dual 10GbE
- Rechenknoten, login, ...: Ubuntu 18.04, NSD-Server: 16.04
- Clusternetz: dual 1GbE, neuere nodes 25GbE Mellanox
- SLURM 17.11.2

Beschaffung und Betrieb

- Finanzierung über die beteiligten Institute und Projekte (SFB, Transregio, BMBF)
- In Berufungsverhandlungen wird eine Beteiligung an diesem Cluster nahegelegt
- Dauerhafte Weiterentwicklung des Clusters, auch mit Serviceverträgen bzw. Wartung zentraler Komponenten und Softwarelizenzen, kein festes Budget
- Beschaffung über Rahmenverträge (Server und Netzkomponenten), koordinierte gesammelte Erweiterung, identische Ausstattung innerhalb einer Generation
- Cluster-Dateisystem GPFS (früher Lustre) mit Unterstützung durch die RZ Server+Speicher-Gruppe (Campusfilesystem mit GPFS)
- Netzkomponenten aus dem Rahmenvertrag, Unterstützung durch die RZ Netzwerk-Gruppe bei Inbetriebnahme, Konfiguration, Überwachung und Support-Abwicklung, baugleiche Switches und Module (Nutzung von RZ Ersatzkomponenten), keine Exoten
- Integration ins IdM und Campus-Filesystem
- Knoteninstallation Ubuntu (früher Debian) über FAI (mit iRMC, iLO), Überwachung mit graphite und check_mk

Anwendungen

- eigene und bekannte Anwendungen, seriell, parallel (meist mit Intel environment) aus Physik, Chemie, Materialwissenschaften: Wien2k, Siesta, VASP, Crystal, Gaussian, GAMESS, Turbomole, Quantum Espresso, CP2K, nwchem, Comsol, Materials Studio, Matlab

Python numpy/scipy (Anaconda, Intel)

- Geographie: regionale Klimamodelle, Fortran codes, R, Python
Intensive Nutzer des GPFS
- bisher nur sporadisch GPU in den nodes, eigene CUDA codes

Aktuelle Projekte

- Migration von GPFS 3.5 auf 5.0 im laufenden Betrieb. 130TB, 50Mio inodes, fast abgeschlossen. Probleme mit metadaten performance, Verzeichnisse mit vielen kleinen files
- Mellanox 25 GbE ConnectX-4-Lx-EN Adapter in allen nodes ab E5-2680v4, Probleme mit DAC Kabeln im rack. Intel MPI Anwendungen laufen (Probleme mit 18.04), MLNX_OFED_LINUX-4.4-2 installiert, noch keine RoCE Daten
- Ständiges Projekt: Anwendungen aktualisieren. In Planung: comsol und Materials Studio mit SLURM

Weiterentwicklung

Höhere Anforderungen mit verstärkt rechenintensiv ausgeschriebenene Neubesetzungen und neue Bereiche wie Medizin, Medizininformatik, Materials Resource Management:

DFG-Großgeräteantrag: größeres einheitliches System, schnelle Vernetzung, GPU, neue Speichersysteme