

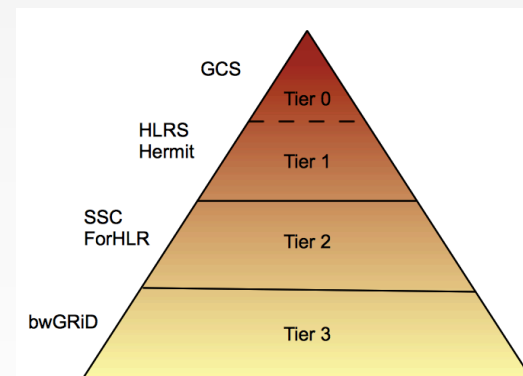
# Das bwGRiD – ”High Performance Compute Cluster“ als flexible, verteilte Wissenschaftsinfrastruktur

Marek Dynowski (Universität Freiburg)  
Michael Janczyk (Universität Freiburg)  
Janne Schulz (Universität Freiburg)  
Dirk von Suchodoletz  
Sven Hermann (KIT)

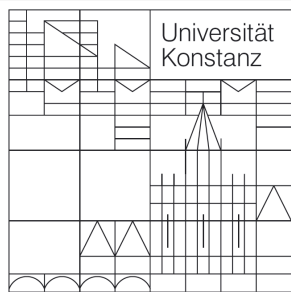


# Heutige Anforderungen an das wissenschaftliche Rechnen

- ◆ Zunehmende Bedeutung von Computermodellen
  - ◆ ... in unterschiedlichsten wissenschaftlichen Disziplinen
  - ◆ ... auch für nicht klassische HPC-Benutzer
  - ◆ Flexible Anpassung an die Anforderung von Anwendern
- ◆ Leicht verfügbare HPC-Ressourcen (Resources on Demand)
  - ◆ HPC als Methode (Verbesserte / Präzisere Rechen-Modelle)
- ◆ Geografische Verteilung
- ◆ Hochverfügbarkeit



# bwGRiD Partner



# Ziele des Projektes

- ◆ Nachweis Funktionalität / Nutzens von HPC-Grid-Konzepten für die Wissenschaft
  - ◆ Identifikation von Anforderungen an solche Umgebungen
  - ◆ Überwindung von Organisations- und Sicherheitsproblemen
- ◆ Bereitstellen von HPC-Service für die akademische Forschung
- ◆ Ablösen des klassischen zentralisierten HPC-Konzeptes

(Aufwendungen werden in einen gemeinsamen Pool überführt, um diese in der Summe effektiver einsetzen zu können)
- ◆ Spezialisierung von Rechenzentren
- ◆ Klärung der Lizenzproblematik

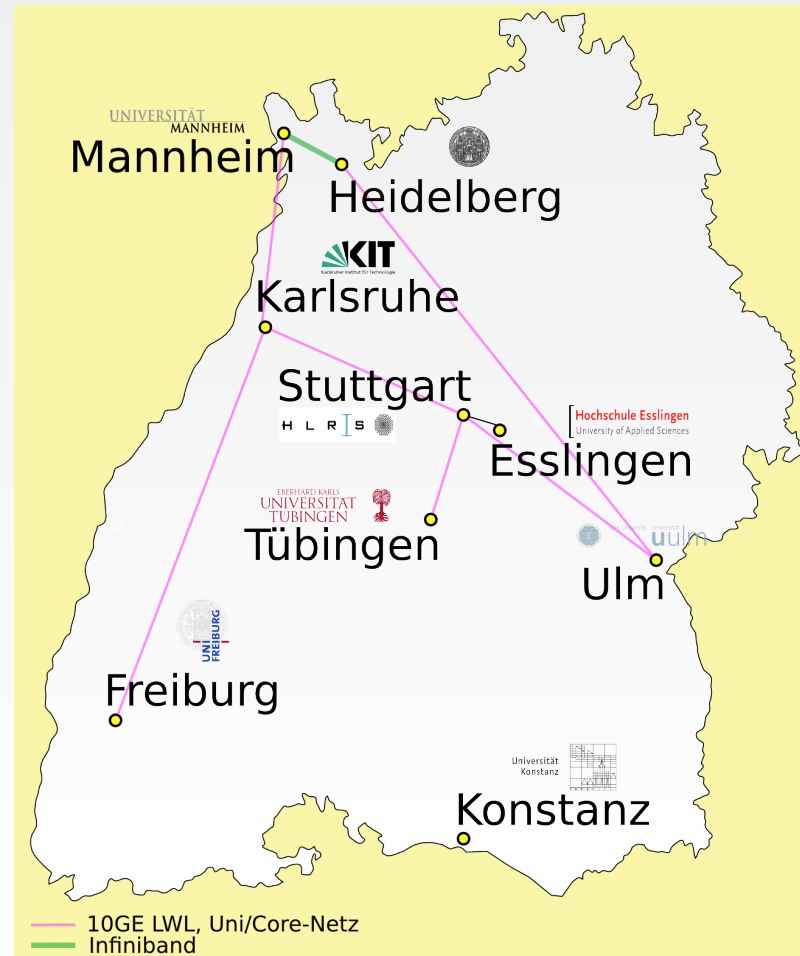


# Voraussetzungen

- ◆ Performante Anbindung der Cluster
- ◆ Hardware muss sich in das Betriebsmodell integrieren lassen
- ◆ Gute Vernetzung und Kommunikation der Projektpartner
- ◆ Gemeinsame Standards für:
  - ◆ Betriebsmodell
  - ◆ Zugriff auf die Ressourcen
  - ◆ Authentifizierung
  - ◆ Verfügbarkeit von Software
  - ◆ Job Policies



# Anbindung der Standorte über BelWü



# Ursprünglich beschaffte Hardware

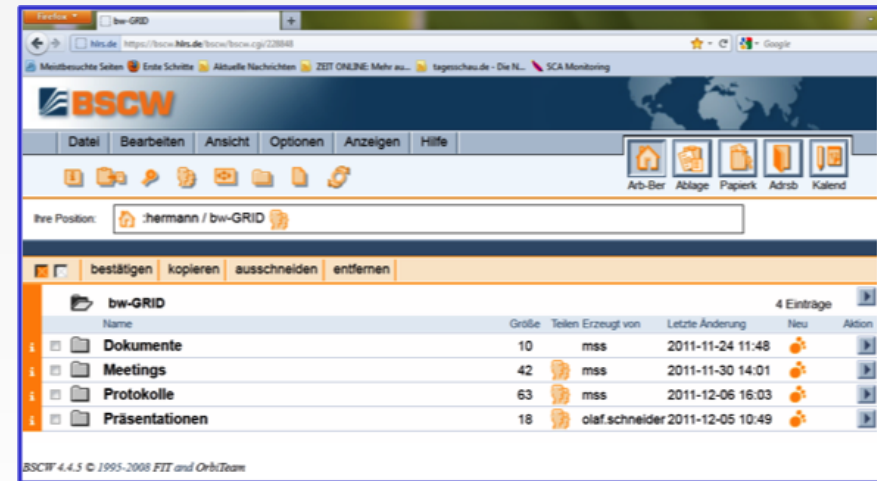
Standort	FR HD KA MA TÜ	ST	UL	ES
IBM Bladeserver HS21 ES (Appro gB222X)	140	434	280	180
IBM BladeCenter H (ES Appro 5U)	10	31	20	18
CPU-Kerne pro Knoten	8	8	8	8
Hauptspeicher pro Knoten [GB]	16	16	16	24
Lok. Festplattenspeicher pro Knoten [GB]	120	0	120	0
Voltaire Infiniband Switch Grid Director ISR 2012	1	2	1	1
Anzahl der Infiniband Ports	168	576	288	192
Frontend IBM xServer x3650	2	2	2	2

Standort	ST UL TÜ	FR HD MA KA ST	KA (zent. Speicher)	ES
Hewlett Packard LustreFS	64TB	32TB	128TB (Backup) 256TB	
NEC, LustreFS				36TB



# Abstimmung der Projektpartner

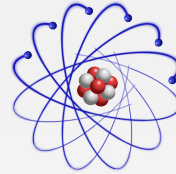
- ◆ E-Mail Listen
  - ◆ Hauptprojekte (cluster-bw)
  - ◆ Unterprojekte (bwGRiD Portal)
- ◆ Zweiwöchig stattfindende Video-Konferenz
- ◆ Gemeinsame Dokumente
  - ◆ BSCW-Groupware
- ◆ Bereitstellung von Software
  - ◆ bwrepo in Freiburg
- ◆ Jährliches F2F Meeting
  - ◆ Unterprojekte





# Gemeinsame Standards in der Arbeitsumgebung

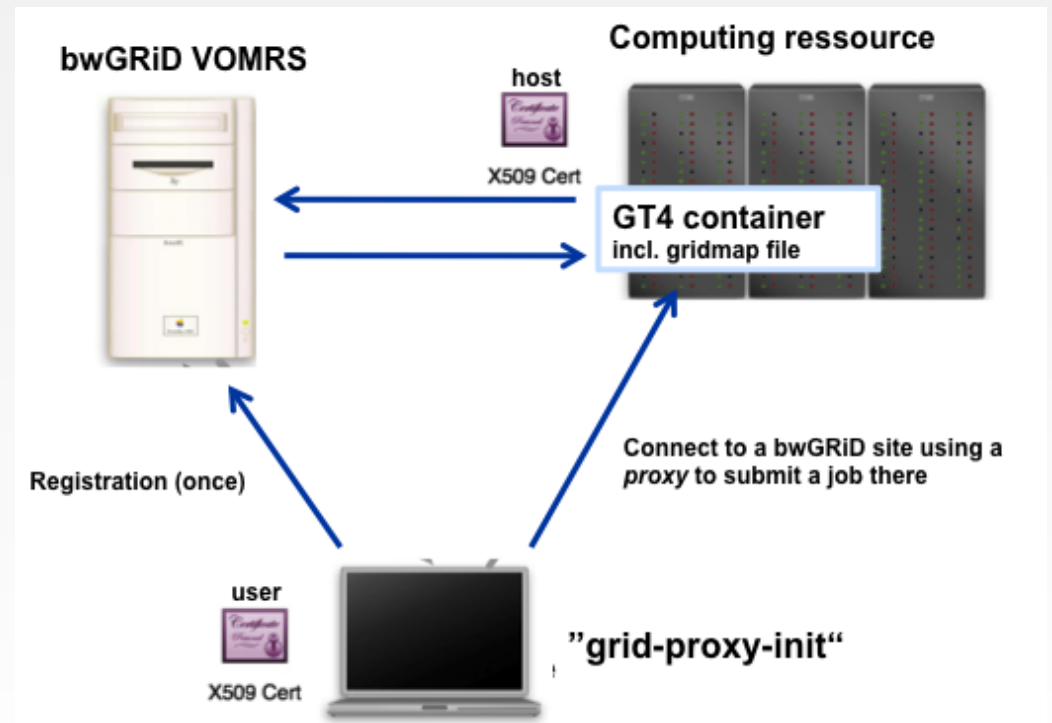
- ◆ Gemeinsames OS
  - ◆ Scientific Linux 5.5
  - ◆ SL6.x ...
- ◆ Standardisierte ENV
  - ◆ TMPDIR → lokaler Speicher
- ◆ Workspace Mechanismus (HLRS)
  - ◆ Speicherplatz auf LustreFS
  - ◆ Mindestlaufzeit 60 Tage
- ◆ Scheduler



# Zugang zu den Ressourcen

Baden-Württembergische  
Universitäten und alle D-Grid  
VOs

- ◆ Lokal (SSH)
- ◆ Globus Middleware (4.0.8)
- ◆ Grid Nutzer über GSISSEH
  - ◆ Grid Zertifikat
  - ◆ VO Mitgliedschaft (D-Grid)



# Bereitstellung von einheitlicher Software

- ◆ *modules* Software  
(temporäre Benutzerumgebung, durch setzen von Umgebungsvariablen)
  - ◆ Parallele Installation mehrere Versionen
  - ◆ Laden und Nutzen der Module bei Bedarf
  - ◆ Softwaremodule können zentral für den Clusterverbund gebaut werden
- ◆ Software ist
  - ◆ ... standortspezifischen Fachgebieten zugeordnet
  - ◆ ... In *mandatory*, *optional*, *local*, (*private*), *on request*
- ◆ Leitfaden für
  - ◆ ... Namensgebung der Module
  - ◆ ... Inhalt der *modulefile*



# Lizenzproblematik

- ◆ bwGRiD als eine Institution
  - ◆ AMBER (400\$)
  - ◆ Intel Compiler Suite (lokale Standortlizenzen, Lizenzserver)
- ◆ Abrufbare Lizenztokens
  - ◆ Schrödinger Molecular Modeling Suite
  - ◆ ANSYS Computer Aided Engineering und Multiphysik“-Software
- ◆ Keine (finanzierbare) Einigung
  - ◆ Computerchemie-Software Gaussian



# Entwicklung des bwGRiDs

## Integration neuer Ressourcen

Standorte	# Knoten	CPU/GPU	RAM (Gbyte)
Freiburg	16	Intel Xeon X5550, 2.67GHz (2x4 Kerne)	24
	8	Intel Xeon X5650X5550, 2.66GHz (2X6 Kerne)	
	4	Intel Xeon E5520, 2.27GHz (2x4 Kerne) / Nvidia Tesla M1060* (2x240 Kerne)	
	1	AMD Opteron 8360 SE, 2.44GHz (8x4 Kerne)	512
AMD Opteron 8384, 2.64GHz (8x4 Kerne)		256	
Stuttgart	8	Xeon 5472, 3.00GHz (2x4 Kerne) / Nvidia Quadro FX 5800 (240 Kerne)	8
	24	CPUs Intel Xeon L5530, 2.4GHz (2x4 Kerne)	72
Tübingen	18	AMD 6172, 2.1GHz (2x12 Kerne)	32
	16	Xeon 5150, 2.66GHz (2x2 Kerne)	
	8	Xeon 5355, 2.66GHz (2x4 Kerne)	16
		Xeon 5150, 2.66GHz (2x2 Kerne)	

- ◆ Exklusive Nutzung
- ◆ Höhere Priorität aber für Grid Nutzer verfügbar
- ◆ Nutzung ohne Einschränkungen

\* 2x Tesla S1070



# Maßnahmen zur Vereinfachung des Zugangs für Grid-ferne Nutzer

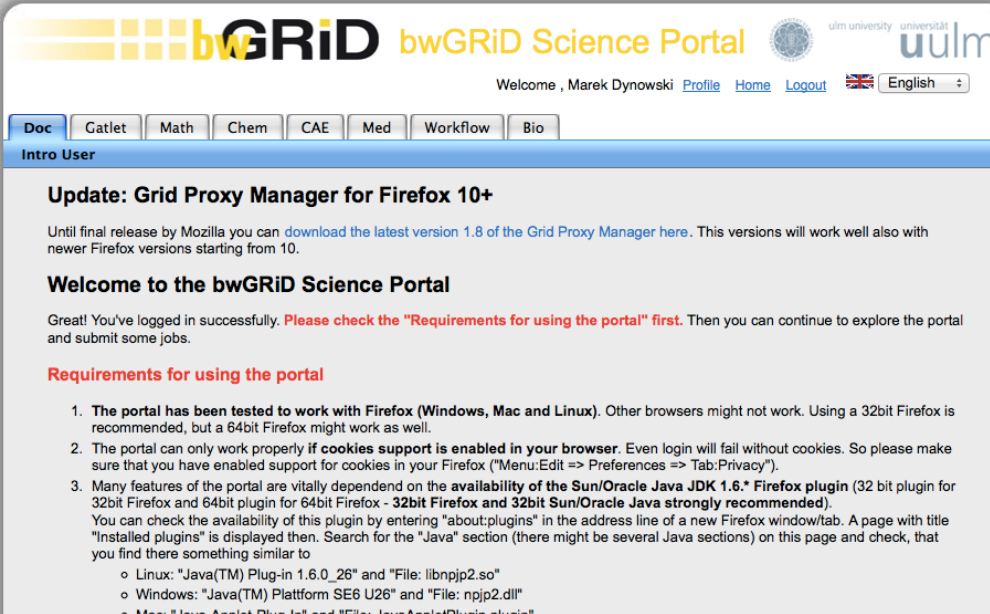
## Förderung durch ergänzende Maßnahmen

- ◆ Videos und Step-by-Step Tutorials (DFN Grid Zertifikat, Mitgliedschaft VO)
- ◆ Installationsskripte für vorkompiliertes GSISsh (Linux, OS X)
- ◆ Dokumentation (Standortunabhängig)
- ◆ bwGRiD VM Ubuntu 10.04 (Tools)
- ◆ Cluster Software Browser
- ◆ Bereitstellen der Materialien auf der zentralen bwGRiD Homepage ([www.bwgrid.de](http://www.bwgrid.de))



# bwGRiD Portal

- ◆ Einfaches Login
- ◆ Tools:
  - ◆ Auslastung
  - ◆ Softwarebrowser
- ◆ Clusterübergreifendes Versenden von Jobs (Meta Submit)
- ◆ Programmspezifische Portlets
  - ◆ Gaussian
  - ◆ Dacapo
  - ◆ ANSYS (CFX, Mechanical)
  - ◆ ...



The screenshot shows the bwGRiD Science Portal user interface. At the top, there is a navigation bar with the bwGRiD logo, the text "bwGRiD Science Portal", and a welcome message for "Marek Dynowski". Below the navigation bar, there are tabs for "Doc", "Gatlet", "Math", "Chem", "CAE", "Med", "Workflow", and "Bio". The main content area is titled "Intro User" and contains an "Update: Grid Proxy Manager for Firefox 10+" section, a "Welcome to the bwGRiD Science Portal" section, and a "Requirements for using the portal" section with a list of instructions.

**Update: Grid Proxy Manager for Firefox 10+**

Until final release by Mozilla you can [download the latest version 1.8 of the Grid Proxy Manager here](#). This versions will work well also with newer Firefox versions starting from 10.

**Welcome to the bwGRiD Science Portal**

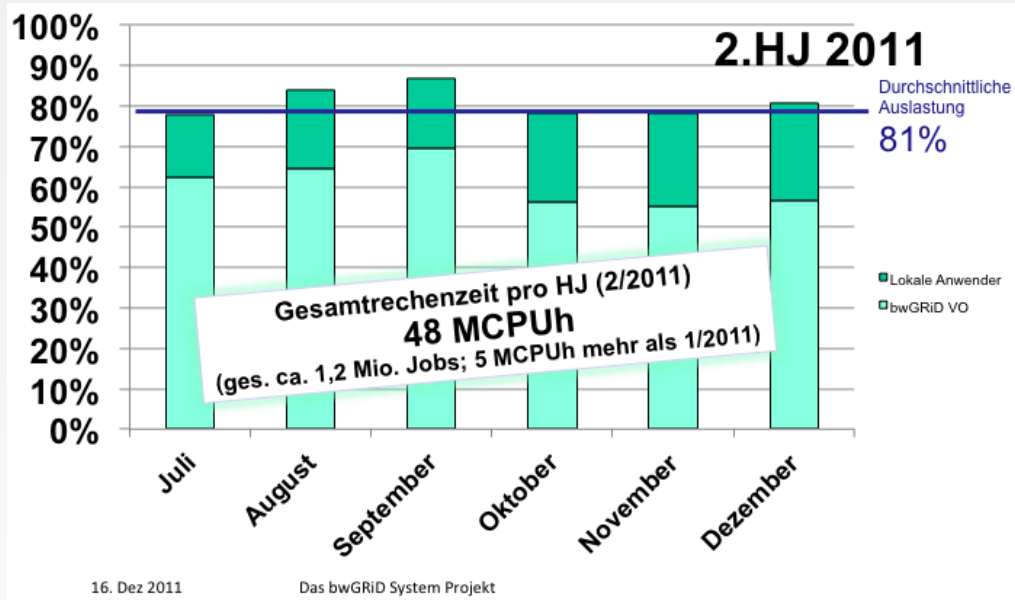
Great! You've logged in successfully. **Please check the "Requirements for using the portal" first.** Then you can continue to explore the portal and submit some jobs.

**Requirements for using the portal**

1. **The portal has been tested to work with Firefox (Windows, Mac and Linux).** Other browsers might not work. Using a 32bit Firefox is recommended, but a 64bit Firefox might work as well.
2. The portal can only work properly if **cookies support is enabled in your browser.** Even login will fail without cookies. So please make sure that you have enabled support for cookies in your Firefox ("Menu:Edit => Preferences => Tab:Privacy").
3. Many features of the portal are vitally dependent on the **availability of the Sun/Oracle Java JDK 1.6.\* Firefox plugin** (32 bit plugin for 32bit Firefox and 64bit plugin for 64bit Firefox - **32bit Firefox and 32bit Sun/Oracle Java strongly recommended**). You can check the availability of this plugin by entering "about:plugins" in the address line of a new Firefox window/tab. A page with title "Installed plugins" is displayed then. Search for the "Java" section (there might be several Java sections) on this page and check, that you find there something similar to
  - o Linux: "Java(TM) Plug-in 1.6.0\_26" and "File: libnjp2.so"
  - o Windows: "Java(TM) Plattform SE6 U26" and "File: npjp2.dll"
  - o Mac: "Java-Applet-Plug-In" and "File: JavaAppletPlugin.plugin"

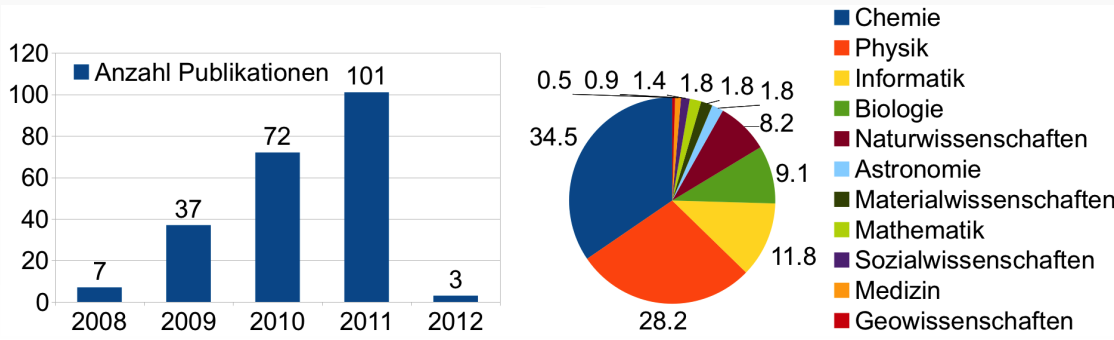
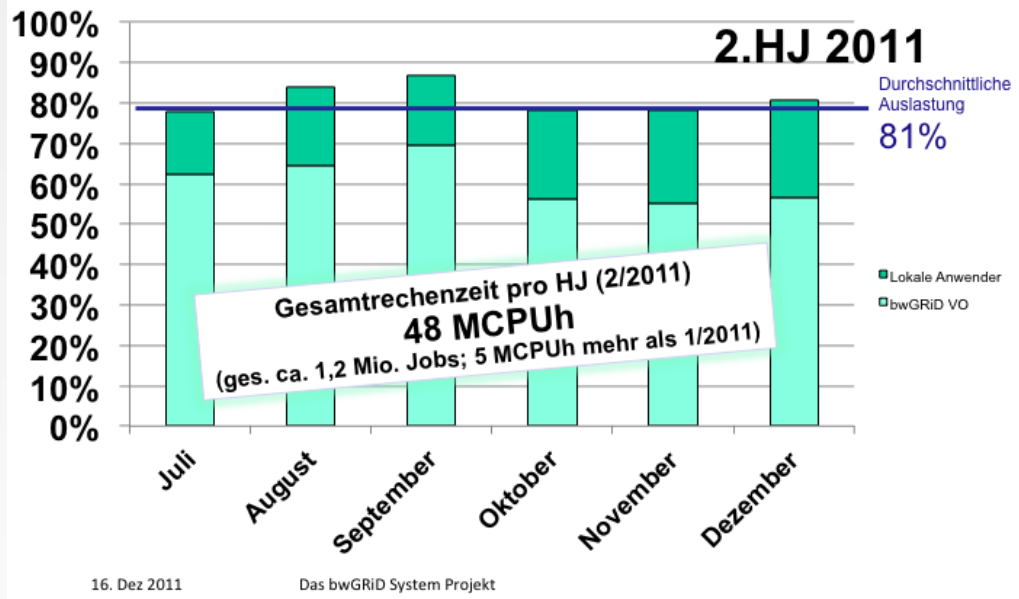
<http://portal.bwgrid.de>

# Ergebnisse





# Ergebnisse



# Ausblick

## Ergänzende Maßnahmen

- ◆ Clusterübergreifendes Scheduling (Moab)
- ◆ Integration bwGRiD in NGI-Helpdesk Ticketsystem
- ◆ Einfache Authentifizierung und Autorisierung Shibboleth
- ◆ Aufbau einer zentrale Datenbank und eines Software- Repositories
- ◆ bwGRiD-Portal Portierung von Portlet-Framework GridSphere auf das leistungsstärkere Liferay
- ◆ Migration von Globus 4 auf Globus 5
- ◆ AG zur Integration neuer Nutzergruppen

# Zusammenfassung

## Das bwGRiD

- ◆ ... ist ein Forschungsprojekt und ein Dienstleister für die Wissenschaft
- ◆ ... ist eine starke Kollaboration, einzigartig in Deutschland
- ◆ ... stellt zurzeit ~14'352 Cores und 770 TB Speicher
- ◆ ... ermöglicht Integration versch. Hardwarearchitekturen
- ◆ Konzept wird durch BelWü ermöglicht
  - ◆ Geografische Verteilung
  - ◆ erhöhte Redundanz der Ressourcen (Hochverfügbarkeit für Anwender)
- ◆ Gemeinsame Standards beim Betriebsmodell
  - ◆ ... dienen Nutzern
  - ◆ ... vereinfachen die Administration der HPC-Cluster
- ◆ ... hat Produktionsqualität erreicht (z.B. Hohe Effizienz)



# Danke!

an den Bund

an das Land Baden-Württemberg, insbesondere das MWK

an alle Standortverantwortlichen

an alle Administratoren

an alle Projektmitarbeiter

an alle Nutzergruppen

an alle hier nicht genannten, die zum Gelingen von bwGRiD  
beitragen und beigetragen haben

... kurzum:

Danke an ein starkes Team!

