

- 27.11.2015 – Burkhard Wald:  
**Über Sudoku-Rätsel und Rainbow-Looms**
- 18.12.2015 – Andreas Michels  
**Extended Minds und die IT - interdisziplinäre  
Betrachtungen zu einer spekulativen These**
- 29.01.2016 – Dominik Brands, Holger Gollan  
**HPC2@UDE - Von der Idee bis zur Inbetriebnahme**
- 26.02.2016 – Andreas Bischoff  
**Von Quadcoptern und Androiden - Aktuelles aus der  
Robotik**
- 18.03.2016 – Marius Mertens  
**Ausfallsicherheit: Fällt sicher aus**

14:00 Uhr  
Duisburg LE 105



***HPC2@UDE***

***Von der Idee bis zur Inbetriebnahme***



Dominik Brands ■ 29.01.2016

mit Unterstützung von Holger Gollan und Olaf Hasemann

UNIVERSITÄT  
DUISBURG  
ESSEN

*Offen im Denken*

- **Einleitung**
- **HPC an der UDE**
- **Der Großgeräteantrag**
- **Standortsuche (Teil 1)**
- **Support-Team Wissenschaftl. Rechnen**
- **EU-Ausschreibung des HPC-Systems**
- **Standortsuche (Teil 2)**
- **Aktueller Stand und Ausblick**



(adaptiert von <https://www.bwhpc-c5.de/>)



## nationalen Höchstleistungs-rechenzentren

- Forschungszentrum Jülich  
JUQUEEN (Blue Gene/Q)  
#11@TOP500 11/2015
- München - Leibniz-Rechenzentrum (LRZ)  
SuperMUC (IBM/Lenovo System x iDataPlex)  
#23@TOP500 11/2015
- HLRS der Universität Stuttgart  
Hazel Hen (Cray XC 40)  
#8@TOP500 11/2015



# HPC an der UDE



# Supercomputer Cray-XT6m



- Inbetriebnahme: Juni 2010
- Standort: Maschinensaal im LE-Gebäude, Duisburg
- 4128 Rechnerkernen (cores)
- 31 Billionen Rechenop./Sekunde (31 TeraFlops)
- AMD „Magny Cours“ Prozessor (1,9 GHz, 12 cores)
- Arbeitsspeicher 4,5 TB RAM
- Festplattenspeicher 32 TB (urspr. 16 TB)
- Anschaffungskosten: ~1,0 Mio. €
- 06/2010: Platz 447 in den Top500-SupercomputerSites (<http://www.top500.org>)
- Auslastung liegt bei ca. 85 % seit Inbetriebnahme (Leerstand durch u.a. Wartung, gezieltes „Leerfahren der Maschine“ für Skalierungstests, ...)

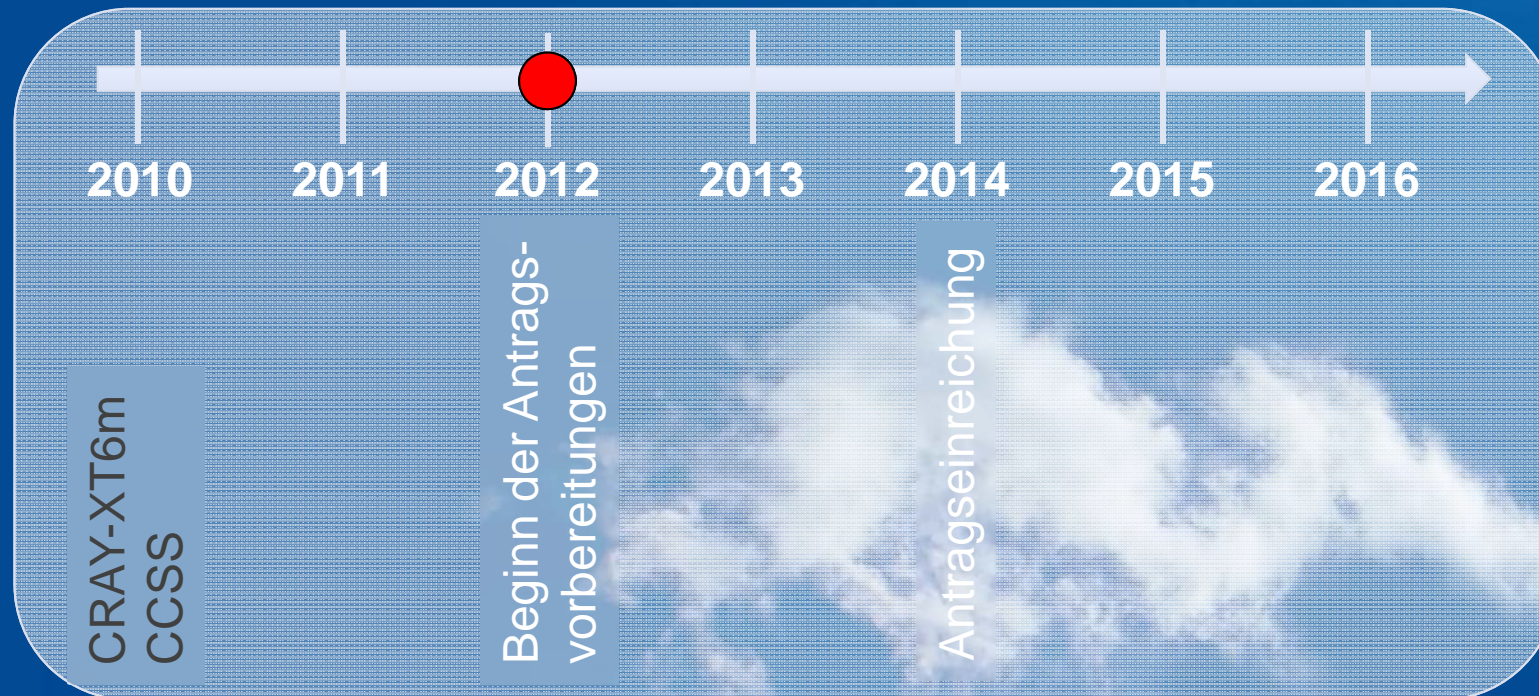


## Center for Computational Sciences and Simulation

- Gründung 30. Juli 2010
- Ziele
  - Bündelung der Aktivitäten des wissenschaftlichen Rechnens (insb. HPC) an der UDE
  - Stärkung für die zukünftigen Aufgaben in Forschung und Lehre
- Mitglieder (nicht nur aus den klassischen Fächern)
  - Naturwissenschaften und Technik (IngWi, Mathematik, Physik, Chemie, Biologie)
  - Wirtschafts- und Lebenswissenschaften (Ökonometrie, Medizin)
- „Erfolge“ seit der Gründung
  - > 300 wissenschaftliche Veröffentlichungen aus den beteiligten Arbeitsgruppen
  - Empfehlung des Rektorats zur Bildung eines Profilschwerpunkts zusammen mit paluno
  - Koordinierung des erfolgreichen Großgeräteantrags für ein neues HPC-System



# Der Großgeräteantrag



- **Förderung durch DFG in Kofinanzierung mit dem jeweiligen Sitzland**
- **Investitionssumme  
50% DFG + 50% Land bzw. Hochschule**
- **in NRW: 40% Land + 10% Hochschule**
- **Die Investitionssumme muss bei den Hochschulen über 200.000 € liegen.  
Die Obergrenze liegt bei 5 Mio. €**

- Formelle Antragssteller: UDE zusammen mit dem Land NRW
- Koordination (federführend): Prof. Dr.-Ing. A. Kempf & Prof. Dr.-Ing. J. Schröder in Zusammenarbeit mit dem CCSS und dem ZIM
- Antragsvolumen: 3,3 Mio. € (Eigenanteil UDE: 330.000 €)

- Inhalt:

- Forschungsprofile der Arbeitsgruppen mit überwiegender Nutzung
- Nutzungskonzept: Betrieb, Unterbringung, Folgekosten (hierzu gleich mehr ...)
- Begründung der Leistungsklasse
- Vergleichsangebote potentieller Lieferanten

– CRAY XC30 LC/AC	6.528 cores	250,7 TFlops/s	3,3 Mio. €
– BULL HPC System	7.500 cores	314,5 TFlops/s	3,0 Mio. €
– IBM HPC Cluster	9.000 cores	180,0 TfFops/s	4,0 Mio. €
– Fujitsu HPC Cluster	8.080 cores	181,0 Tflops/s	3,9 Mio. €

← favorisiertes System:  
- bekannte Systemumgebung  
- schneller Interconnect  
- geringer Portierungsaufwand

- Im Antrag muss sich die Hochschule zur Übernahme der Kosten für Unterbringung und Unterhaltung inkl. aller Folgekosten verpflichten

## → Rektoratsbeschluss vom 12. Februar 2014:

- „Zur Stärkung des Hochleistungsrechnens ... an der UDE beschließt das Rektorat einstimmig

- „... Antrag auf Förderung eines Hochleistungsrechners ... von € 4 Mio. ...“

- Übernahme der „Nebenkosten“

- a) Miet-/Nebenkosten in Höhe von maximal € 150.000 / a,

- b) Erstinvestitionskosten in Höhe von maximal € 500.000,

- c) Betriebskosten in Höhe von maximal € 500.000 / a,

- d) LWL-Anbindungskosten von maximal € 100.000 / a.

(entspricht 8 Mio. € über 10 Jahre)

- Bildung eines Support-Teams (später mehr ...)

Anmerkung: Die Standortsuche war zu diesem Zeitpunkt bereits „im Gange“

## → Einreichung des Antrags im Februar 2014

# Das große Warten

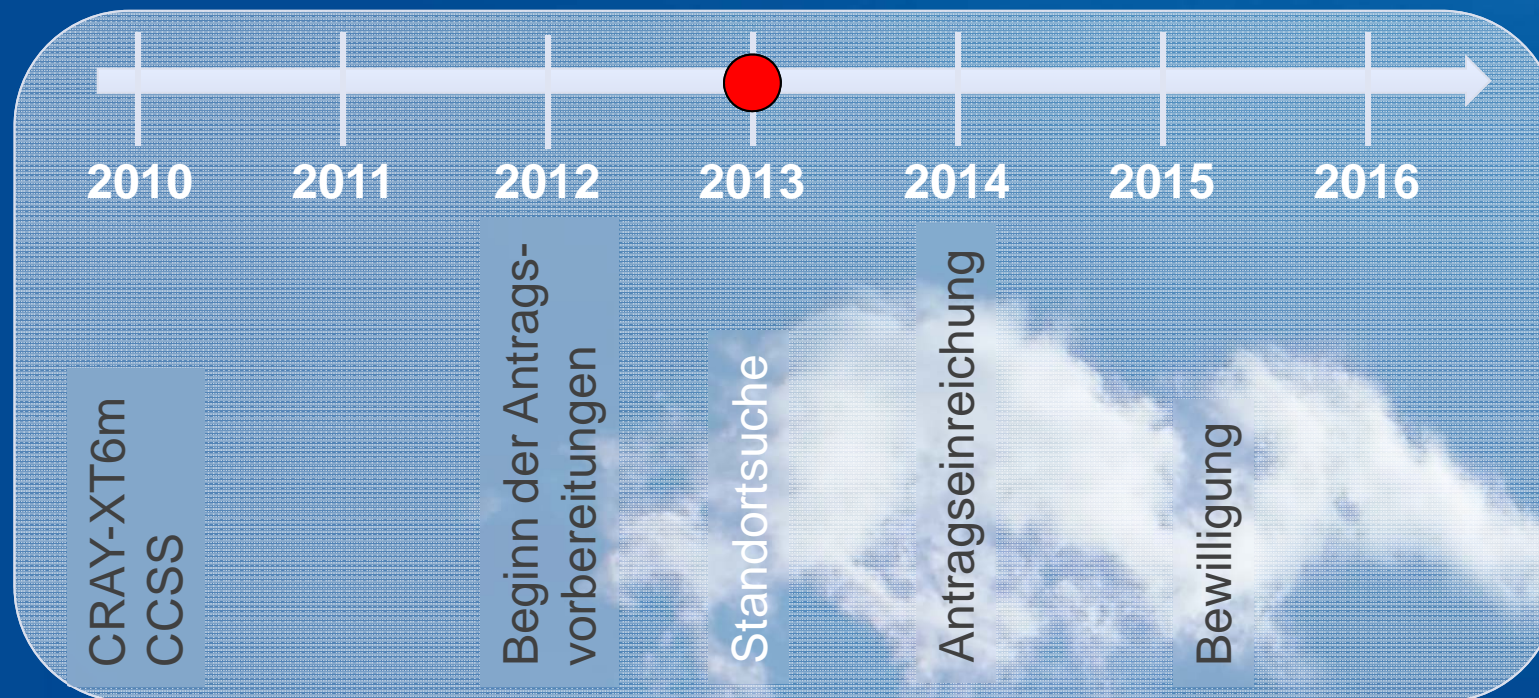


## 30. März 2015 Post von der DFG

„Die DFG bewilligt ... Investitions-  
mittel zur Beschaffung eines  
Großgerätes: Massiv paralleler Hochleistungs-  
rechner mit schneller Vernetzung  
Bis zur Höhe von 1,65 Mio. € ...“

- **DFG:** „Die Mittel müssen innerhalb von 12 Monaten ab dem Zugang der Bewilligung in Anspruch genommen werden.“
  - ➔ **24.03.2016**
  - ➔ **gilt für 50% der Gesamtsumme (= DFG-Anteil)**
- **Land NRW:** Verausgabung innerhalb des Haushaltsjahres der Bewilligung
  - ➔ **31.12.2015 (+ ca. 2 Monate Bereitstellung)**
  - ➔ **gilt für 40% der Gesamtsumme (= NRW-Anteil)**
- **Hochschule:** keine explizite Vorgabe
  - ➔ **gilt für 10% der Gesamtsumme**

# Standortsuche (Teil 1)



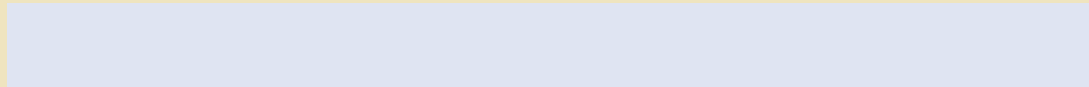


- Klimatisierung
  - Temperatur
  - Luftfeuchtigkeit
- Strom
- Netzwerkanbindung
- Zugang / Anlieferung
- Zutrittskontrolle
- Deckenlasten (HPC System > 1t/m<sup>2</sup>)

## Interne Lösung möglich?

- Schützenbahn SL 012 oder Maschinsaal Duisburg LE 009
  - Beide Standort kamen nicht in Frage:
    - un-wirtschaftlich aufgrund der hohen Umbaukosten
    - Platzmangel und Lärmbelästigung angrenzender Gebäude/Räume
    - Zusätzliche Serverflächen für ZIM sollten in dieser Maßnahme integriert werden (Stichwort: Sanierung LE, Stromkapazität und Deckenlasten SH)
- Ende 2013 wurde dann die Suche auf externe Standort erweitert

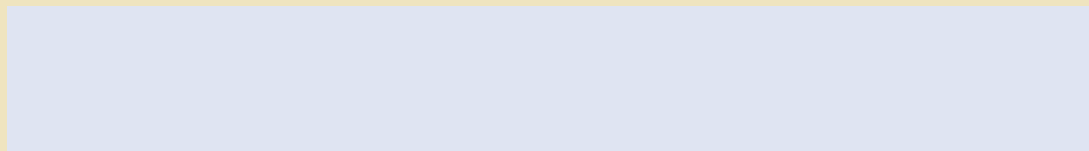
- Favorit



Keine langfristige Mietperspektive

- Alternativen

- „Campus Altenessen“, Teilungsweg 28

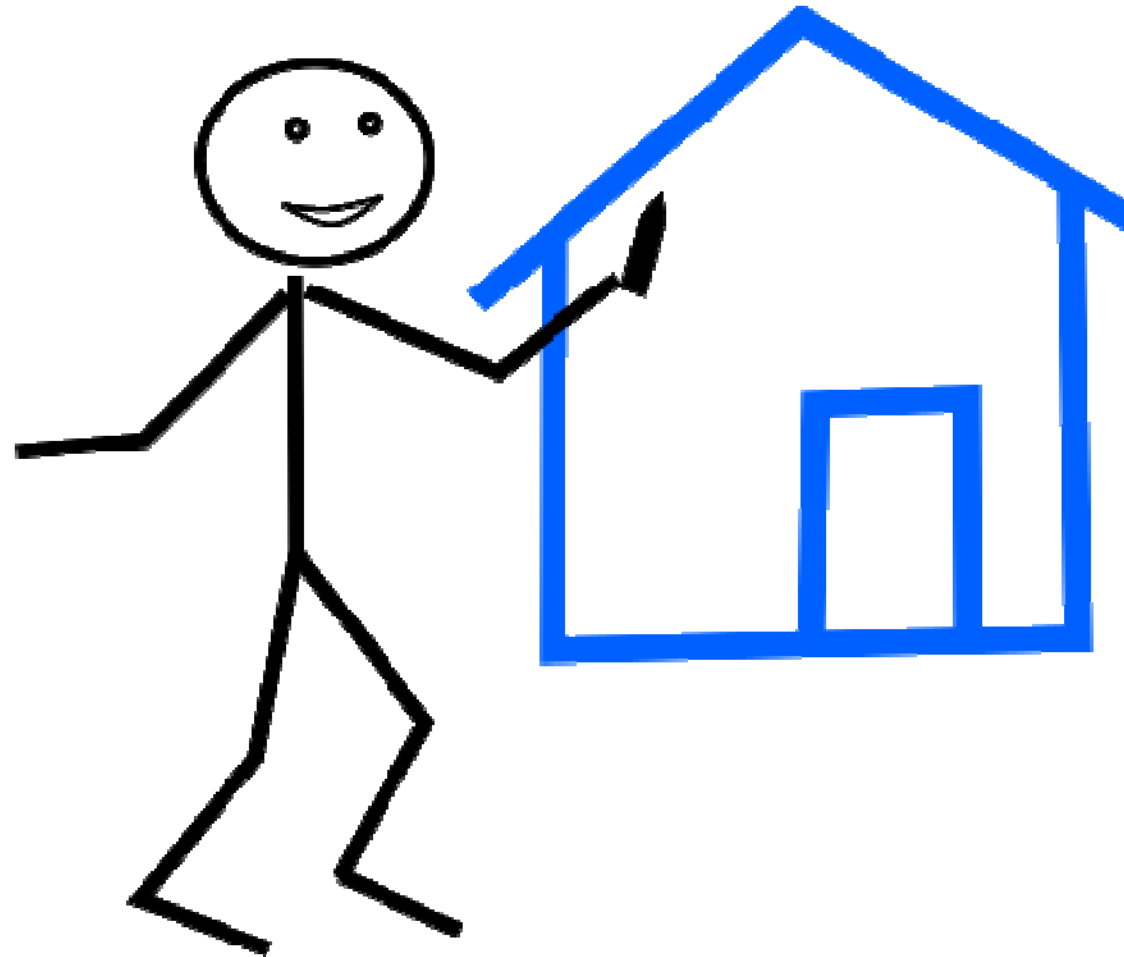


← Favorit

## Rektoratsbeschluss vom 23. Juli 2014

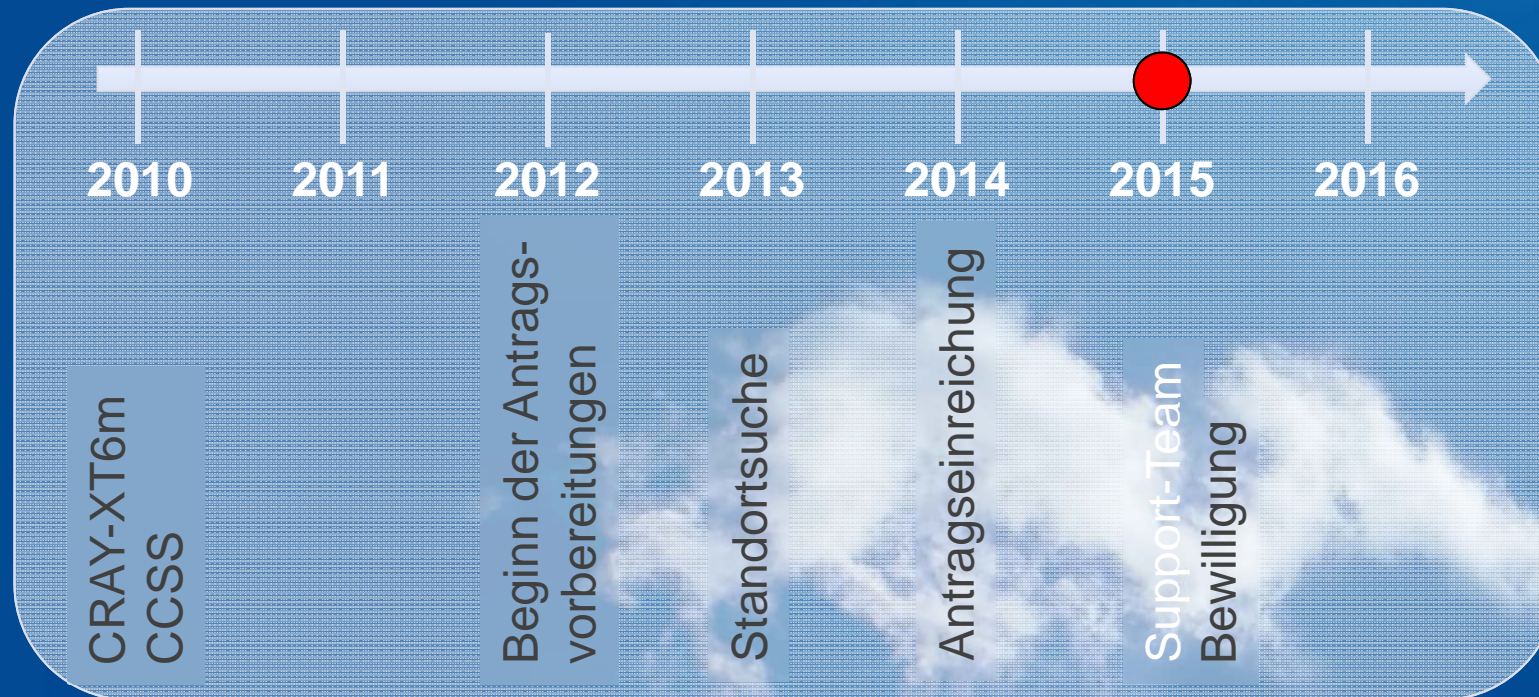
- Anmietung zusätzlicher Serverraumkapazität (Gesamtkonzeption 10 Jahre)
- Budget für die Maßnahme: 3 Mio. Euro (Anmerkung: Beschluss 12. Februar 2014 bleibt unberührt) → Gesamtmaßnahme 11 Mio. Euro
- „Im machbaren Umfang sind die dezentralen Standorte von Servern in den Fakultäten aufzugeben und die Server in das neue Rechenzentrum zu überführen.“

# Die Planungen beginnen ...



... später mehr ...

# Support-Team Wissenschaftl. Rechnen



- Ausgangspunkt: Rektoratsbeschluss vom 12.2.2014
  - Zielvorstellung des CCSS und ZIM
    - Stärkung des Bereichs des Wissenschaftlichen Rechnens an der UDE
  - 2 Mitglieder: Wissenschaftler aus Arbeitsgruppen der UDE mit der Ausrichtung auf das wiss. Rechnen; Einsatz im Rahmen einer Teilumsetzung (50%)
  - Aufgaben des Support-Teams
    - Anwender/innen im Wissenschaftlichen Rechnen beraten und unterstützen
    - Einführung der Nutzer in die HPC-Umgebungen der UDE
    - Unterstützung der Nutzer beim Einsatz eigener Softwarelösungen auf HPCs@UDE
    - Angebot von Schulungen im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens
    - Ansprechpartner bei der Beschaffung neuer Geräte zum wissenschaftlichen Rechnen
    - Aufbau einer Support-Struktur im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens an der UDE
- Erstes großes Projekt: Beschaffung und Aufstellung HPC2@UDE**

- Kontaktmöglichkeiten:

- Homepage

- [https://www.uni-due.de/ccss/sc\\_support.php](https://www.uni-due.de/ccss/sc_support.php)

- Email

- [hpc-support@uni-due.de](mailto:hpc-support@uni-due.de)

- OTRS:

- ZIM::Wissenschaftliches\_Rechnen::Beratung
- ZIM::Wissenschaftliches\_Rechnen::Stoerungen

- Moodle

- Zentrale wissenschaftliche Einrichtungen
  - / ▶ CCSS - Center for Computational Sciences and Simulation
  - / ▶ Scientific Computing Support

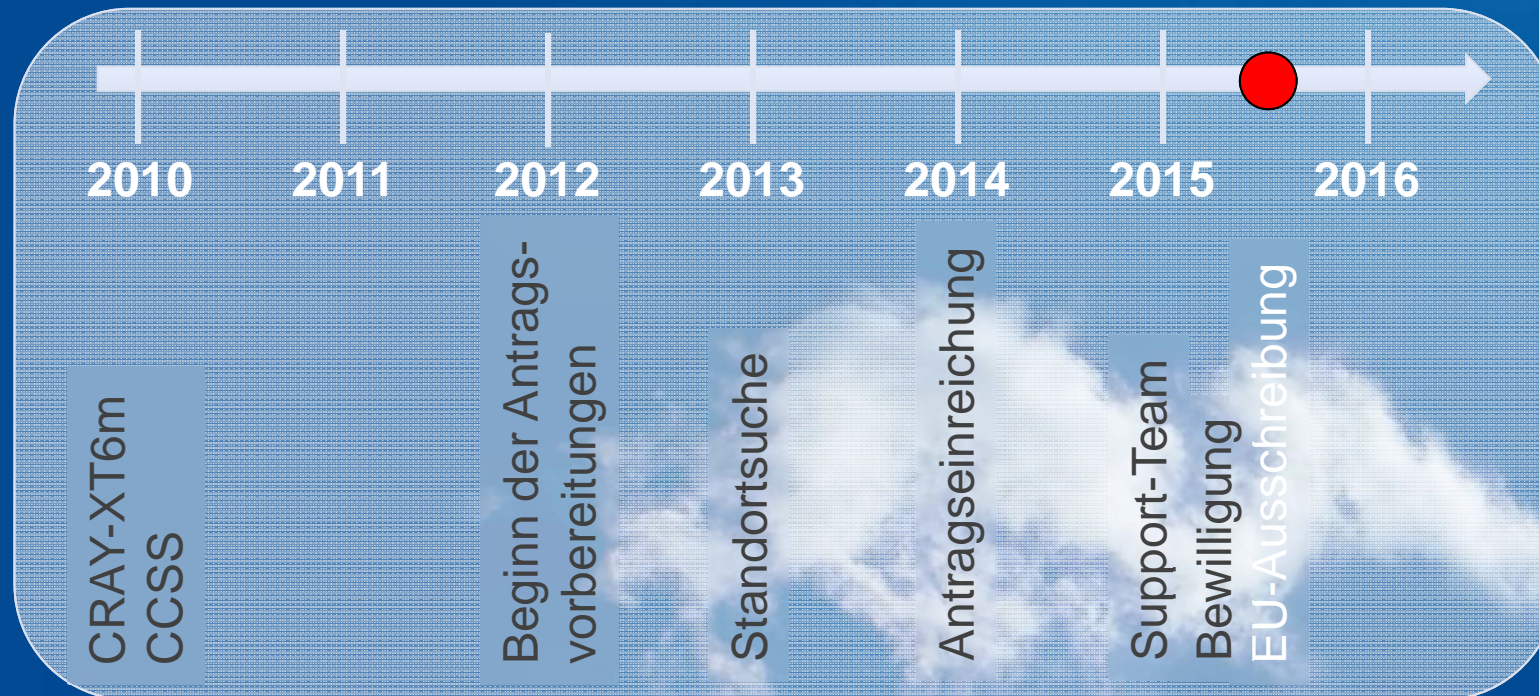
Dipl.-Inf. O. Hasemann  
Lehrstuhl für Fluidodynamik  
Maschinenbau / IngWi



Dr.-Ing. D. Brands  
Institut für Mechanik  
BauWi / IngWi



# EU-Ausschreibung des HPC-Systems



- **Erstellung der Leistungsbeschreibung** Anfang 2015
- **EU-Ausschreibung (min. 8 Wochen)** 6.8.2015 – 25.9.2015
- **Auswertung der Angebot** Mitte Okt. 2015
- **Zuschlagserteilung inkl. Wartefrist für Einsprüche (ca. 2 Wochen)** 17.11.2015
- **Erstellung der Vertragsdokumente hier: EVB-IT Systemlieferungsvertrag** ca. 3 Tage  
im Nov. 2015
- **Lieferung** voraussichtlicher Lieferbeginn Feb. 2016



- **Budget: 3,3 Mio. Euro**
- **Randbedingungen (die Wesentlichen...)**
  - keine Überschreitung des Budgets
  - 2 Referenzinstallationen in der aktuellen TOP500-Liste vom Juni 2015
  - indirekte Wasserkühlung, Wassertemperatur 12-15 Grad Celsius
  - Leistungsaufnahme unter 200 kW, Einhaltung der Standfläche
  - x86\_64 Prozessoren mit mindestens 8 Cores pro Socket
  - mindestens 2,6 GB RAM pro Core, für mind. 1/8 der Cores doppelter Hauptspeicher
  - homogenes Verhalten über die gesamte Maschine
  - paralleles Filesystem mit mind. 450 TB nutzbarem Plattenplatz
  - Durchführung der Benchmarks
  - ...
- **Auswahlkriterium: Ergebnis der Benchmarks & Anzahl der Cores**

- **Strong Scaling Test der Applikationen**  
(„fixed problem, increasing compute resources/cores“)
- PsiPhi (psiphi): InHouse Large Eddy Simulation Code (numerischen Berechnung von turbulenten Strömungen); Fortran; MPI  
→ 2 Serien: 3/5 Läufe
- Particles (part): Studentische Übung; plain C; MPI - OpenMP hybrid  
→ 2 Serien: 4 Läufe
- OpenFOAM + User-Erweiterung (openfoam): CFD (Computational Fluid Dynamics; Numerische Strömungsmechanik); C++; MPI  
→ 2 Läufe
- VASP5 (vasp): „Vienna Ab initio Simulation Package“ Quantenmechanische Molekulardynamik Simulationen; Fortran; MPI; Numerische Bibliotheken  
→ 2 Serien: 2/4 Läufe

- **Bewertung der Ergebnisse**

- Je Applikation werden verschiedene Metriken protokolliert, z.B. ExecutionTime, output, exchange, ParSwap, Total  
→ Performance von Netzwerk-Interconnect, File-System, Prozessoren, ...

- Applikation-Objective ( $ObjApp\_i$ ) berechnet aus gewichteten Metriken je Serie:

$$ObjApp\_i = \text{sum}(w\_clock * SerDat)$$

- Gesamt-Objective aus Summe der gewichteten  $ObjApp\_i$ :

$$ObjTM = \text{sum}(w\_i * ObjApp\_i)$$

mit  $w\_psiphi=0,4$ ;  $w\_part=0,2$ ;  $w\_openfoam=0,2$ ;  $w\_vasp=0,2$

- Berücksichtigung der Anzahl der Cores (NumCores)

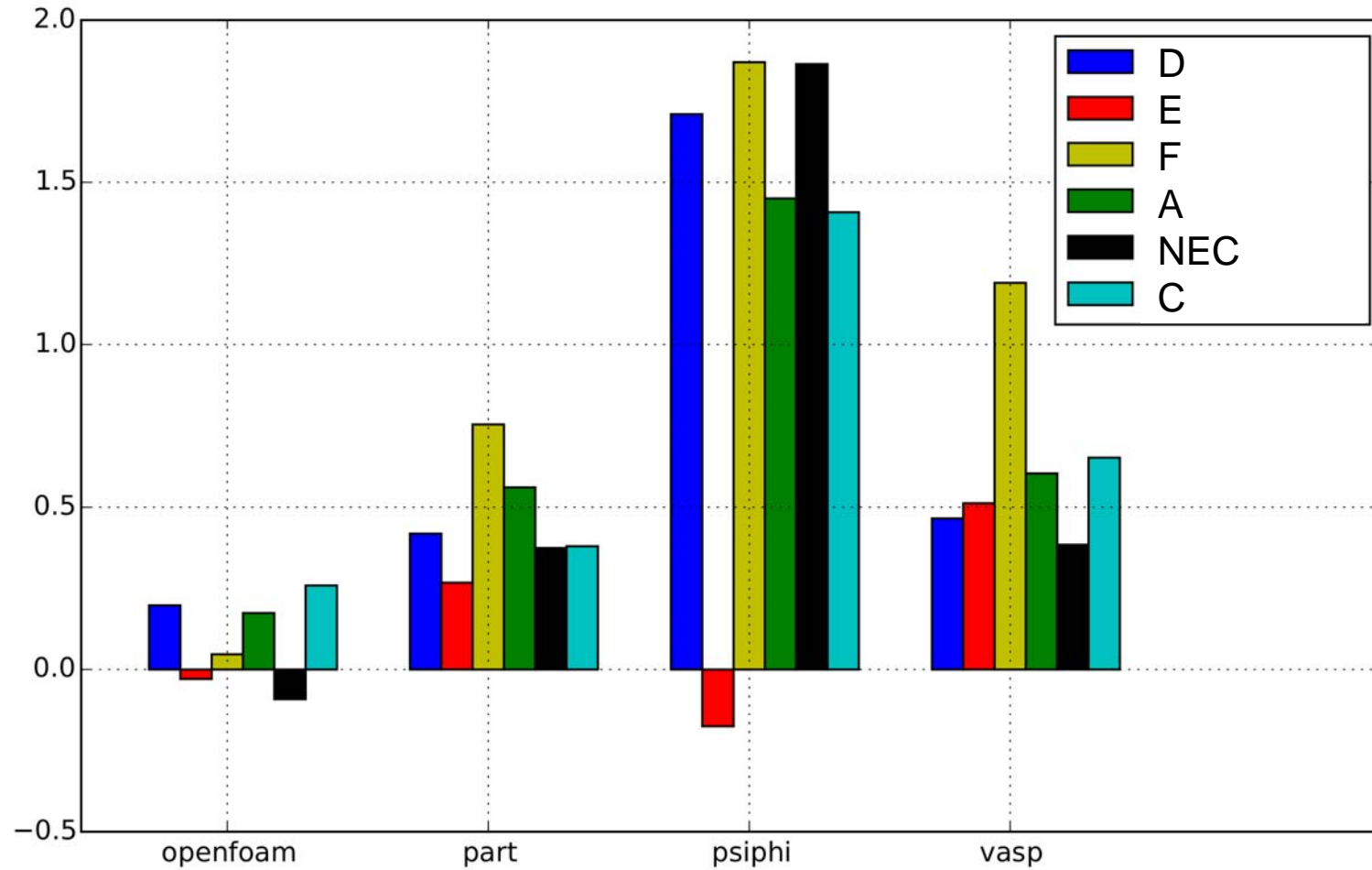
$$ObjOverall = ObjTM + \log_2(NumCores / 8192)$$

→ Bewertungskriterium bei der Auswertung der Angebote

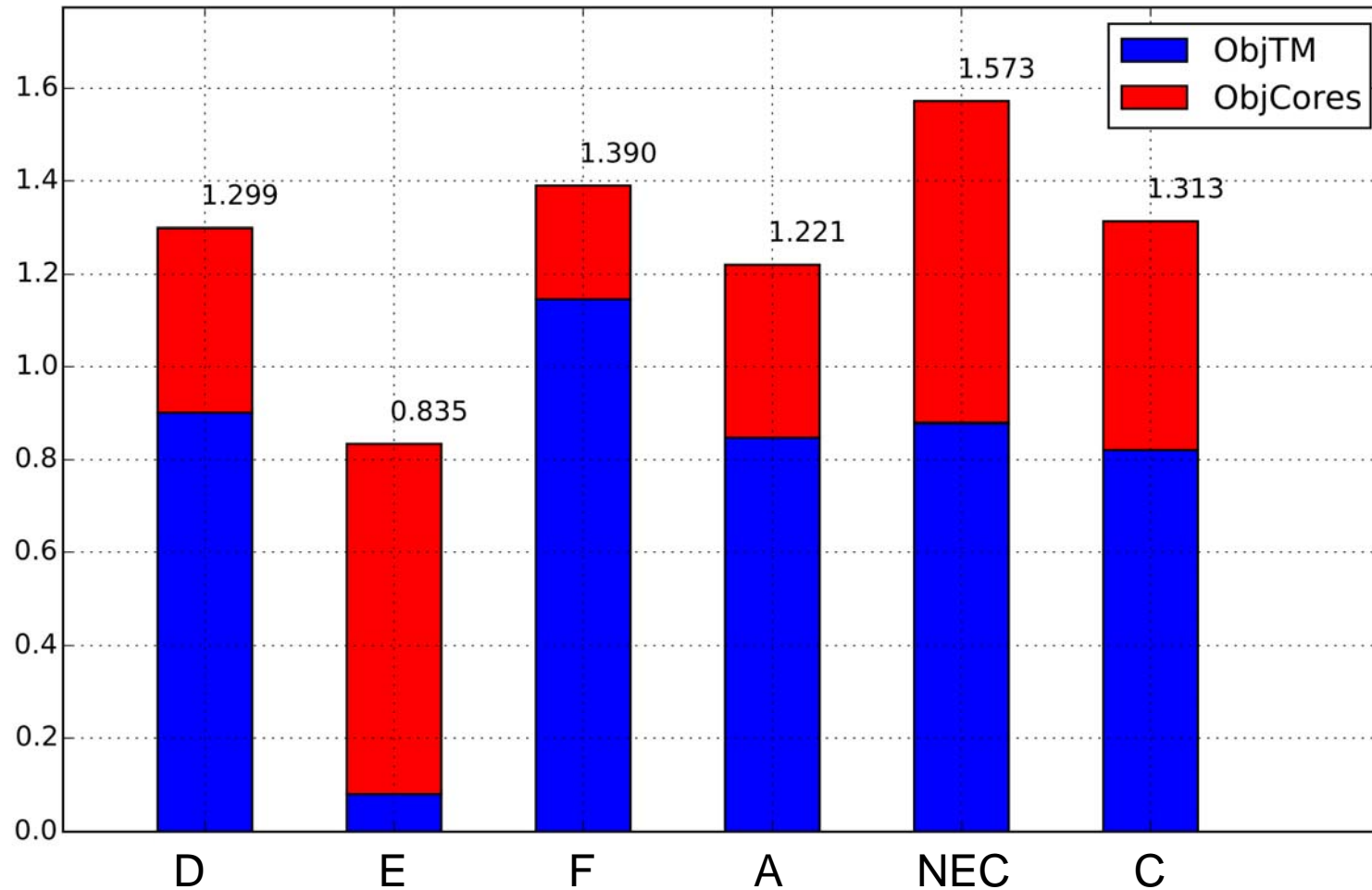
# Angebote und Auswertung

	A	NEC	C	D	E	F
CPU (Intel)	2x 2680v3	2x 2650v4	2x 2680v3	2x 2670v3	2x 2650v4	2x 2698v3
Gen.	Haswell	Broadwell	Haswell	Haswell	Broadwell	Haswell
Cores/Socket	12	12	12	12	12	16
#nodes	442	552	480	450	576	303
#cores	10.608	13.248	11.520	10.800	13.824	9.696
Tot. RAM	31.824 GB	39.744 GB	34.500 GB	32.400 GB	41.472 GB	43.632 GB
Par FS	BeeGFS	Lustre	GPFS	Lustre	BeeGFS	Lustre
InterConnect	OPA	FDR	FDR	FDR	OPA	FDR
	A	NEC	C	D	E	F
ObjTM	0,848	0,879	0,821	0,900	0,080	1,147
$\log_2(\text{NumCores} / 8192)$	0,373	0,693	0,492	0,399	0,755	0,243
ObjOverall	1,221	1,573	1,313	1,299	0,835	1,390

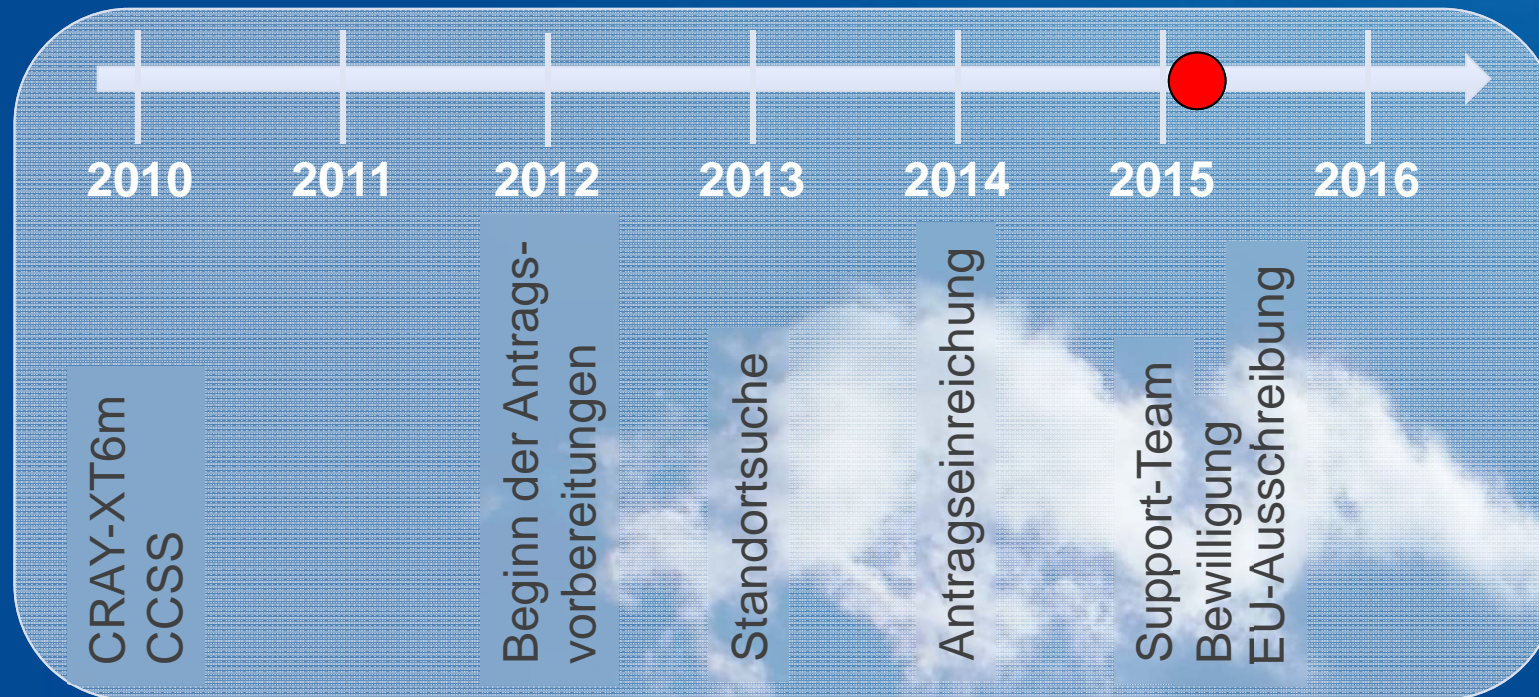
# Vergleich nach Applikationen



# Vergleich der Gesamt-“Performance“



## Standortsuche (Teil 2)



- **April 2015: Objekt „Teilungsweg“ wird verworfen, u.a. fehlende Langfristigkeit**
- **Neue Suche nach Alternativflächen:**
  - Server-Housing im Jülicher Supercomputing Centre
    - ➔ Im Juli 2015 verworfen, da keine terminliche Einhaltung absehbar
  - Anmietung Rechenzentrumsfläche bei der DU-IT (Tochtergesellschaft der DVV)
    - DU-IT baut neues Rechenzentrum und hat dort noch Flächen frei
    - Vorteil: Komplette Neuanlage des RZ in bestehenden Räumlichkeiten
      - ➔ UDE konnte „viele Wünsche äußern“: Strom-/Kälteleistung, Sicherheitszonen, ...
    - Mai 2015 starteten die gemeinsamen Planungen für die anzumietende Fläche
    - Beteiligte Bereiche der UDE: Gebäudemanagement (Projektleitung), ZIM, CCSS, Support-Team, Brandschutz, Datenschutz, Personalrat, Arbeitssicherheit, ...



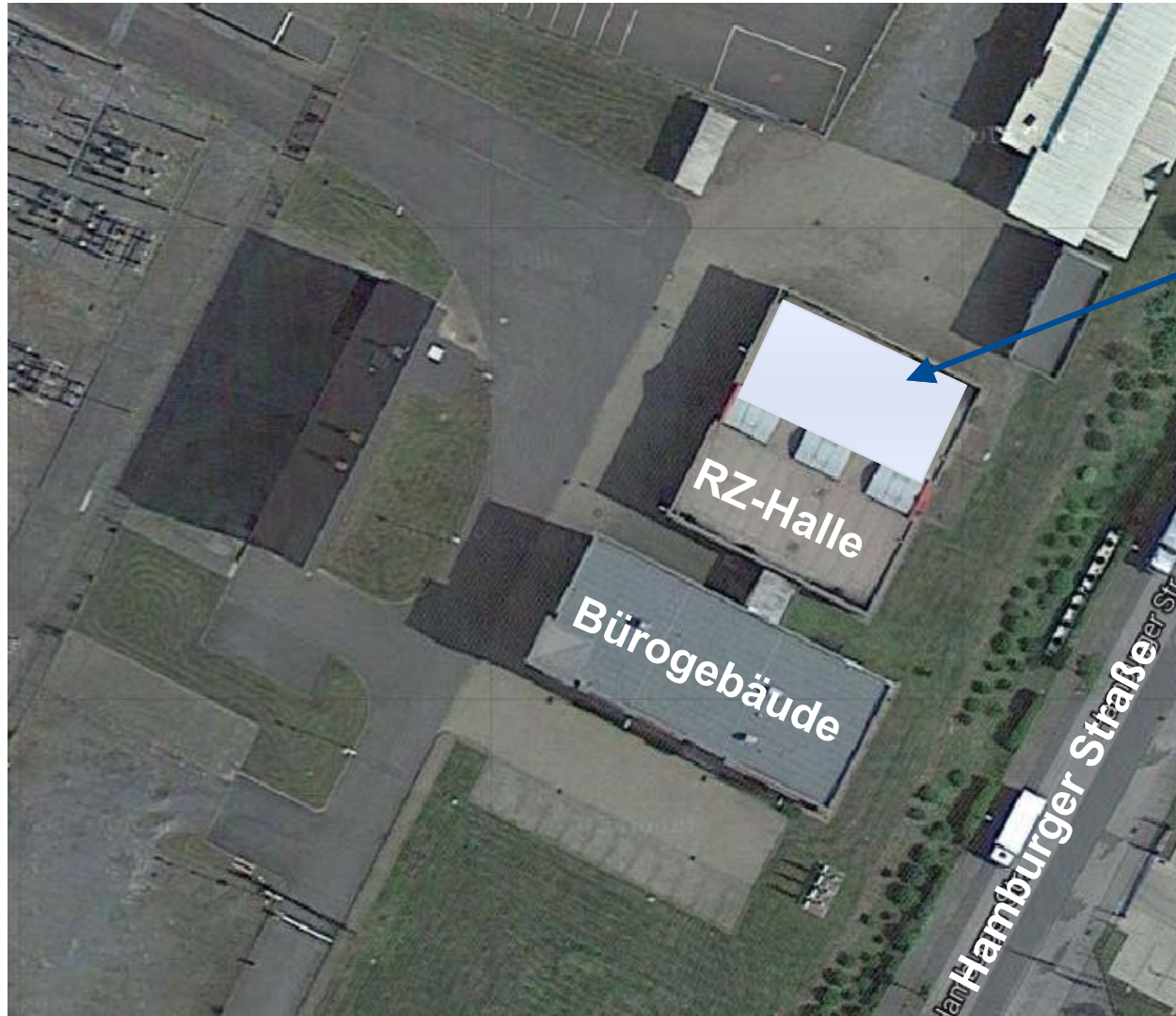
Wo?



Campus Duisburg

Hamburger Straße

# Welche Gebäude?



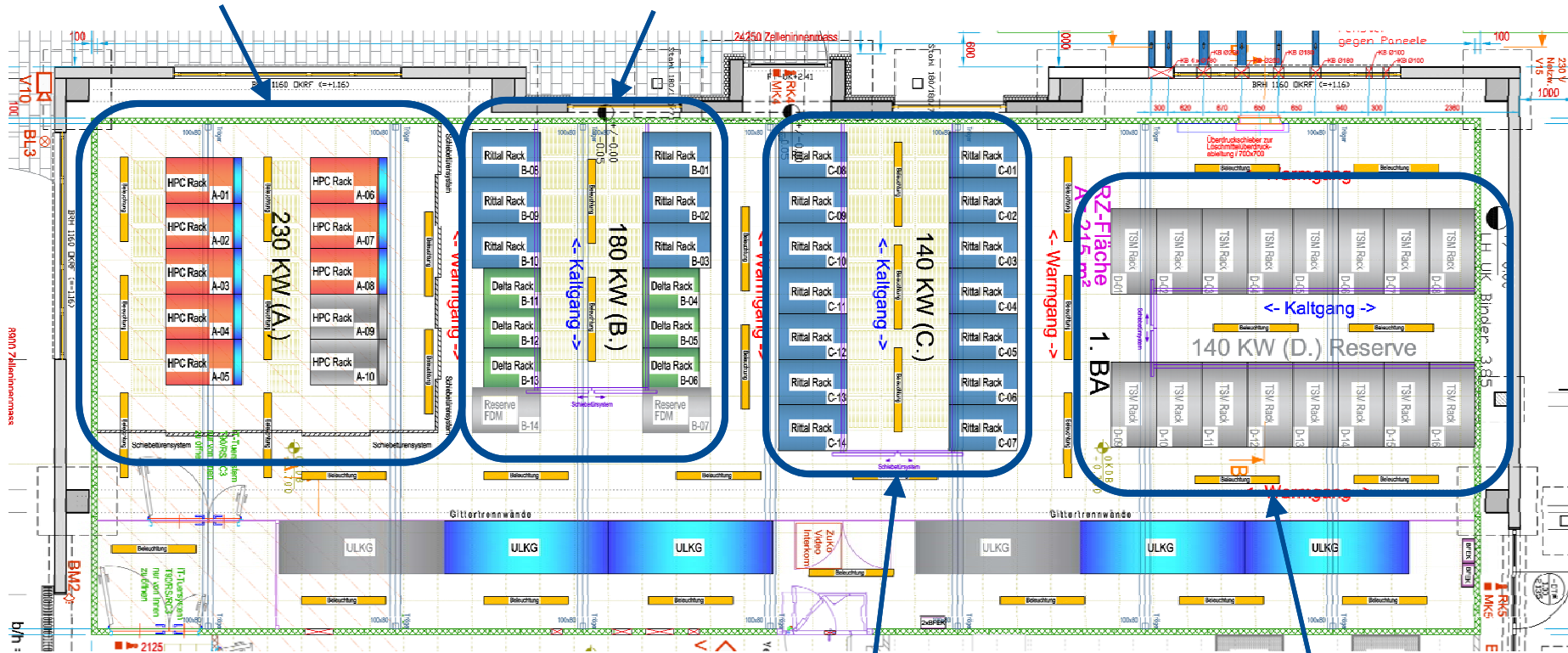
UDE-  
Fläche

- **3 Gänge mit Kaltgangeinhaus (Luftkühlung)**
- **1 Gang mit indirekter Wasserkühlung (Rücktüren)**
- **Max. 690 kW (540 kW USV) im Endausbau**
- **Netzersatzanlage (Notstromdiesel)**
- **230 KW für HPC2/NEC-System**
- **Redundante LWL-Anbindung an UDE Netz**
- **4 Zonen Sicherheitskonzept**

# UDE-Fläche im RZ DU-IT

**NEC HPC2**  
inkl. Erweiterungsplatz

**Ausgelagerte Wiss.Rechnen System**  
u.a. Opterox-Cluster, Cluster AG Kempf, ...



**Auslagerung und  
Neubeschaffungen ZIM**

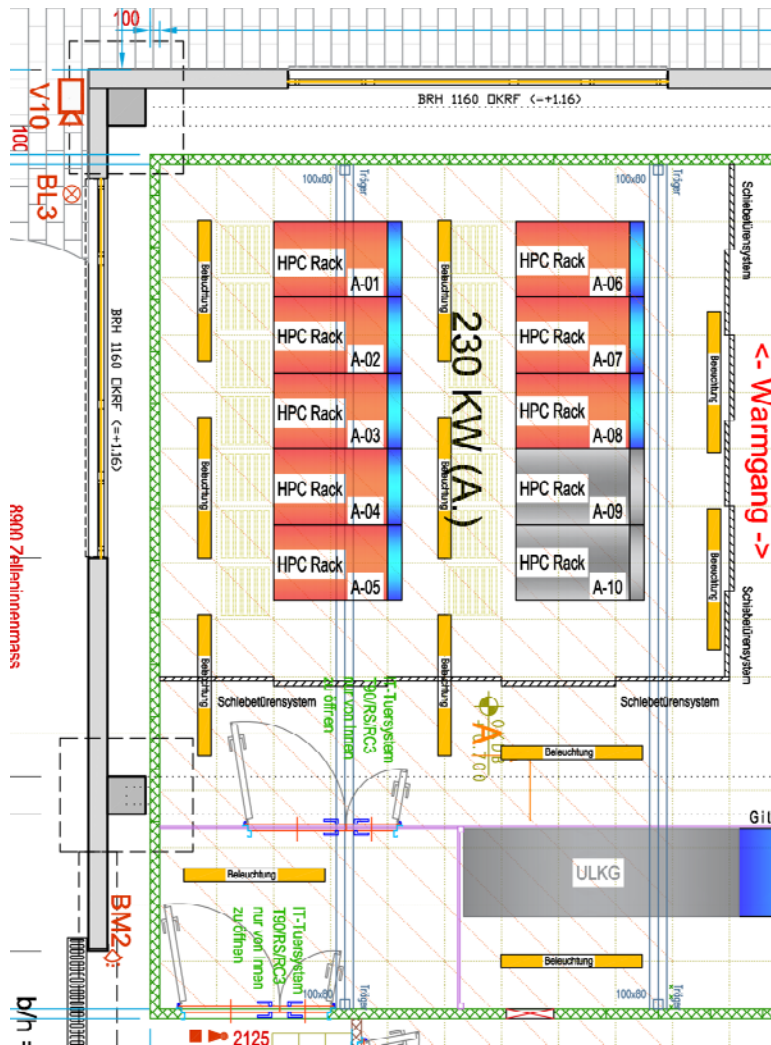
**TSM Library**

(Stand: 29.1.2016)

**Brands: HPC2@UDE**

29.01.2016

# Klimatisierungskonzept -- „Tücken im Detail“



- Problempunkt: 2 verschiedene Kühlkonzepte
  - Luftkühlung mit Einhausung  
→ Kaltgang: 21-23 °C ; Warmgang: 25-26°C
  - Indirekte Wasserkühlung über Rücktüren  
→ konstante Umgebungstemperatur 21-23°C

**⚡ Abluft des Warmgang stört Klimazone HPC2 ⚡**

- Lösungen
  - Feste Abtrennwand → Platzmangel ❌
  - Flexible Abtrennung mittels Schiebeelement ✓

# Aktueller Stand und Ausblick

- **Technische Anpassung**

- Ggf. Umstieg auf Intel OmniPath (OPA) an Stelle von FDR:
  - geringere Latenzen, größere Compute-Inseln mit 1:1 Blocking (32 statt 24 ComputeNodes á Switch), höhere Bandbreite, Traffic-Verschränkung
  - leicht kostengünstiger → zusätzliche ComputeNodes

- **Daten**

- KW 11 2016 : Aufbau der Racks
- Ende April 2016: Benchmarks für HPC TOP 500 Liste
- „echter“ Produktivstart Anfang Mai 2016

# Rechenzentrum Hamburger Straße

UNIVERSITÄT  
DUISBURG  
ESSEN

*Offen im Denken*



Aussenansicht  
RZ-Halle

Brands: HPC2@UDE

29.01.2016





Innenansicht  
UDE-Fläche  
(HPC2 – Gang A)

# Rechenzentrum Hamburger Straße

UNIVERSITÄT  
DUISBURG  
ESSEN

*Offen im Denken*



Innenansicht  
UDE-Fläche  
Gang C & D

Brands: HPC2@UDE

29.01.2016

**ZiM**  
Zentrum für Informations- und Mediendienste

# Rechenzentrum Hamburger Straße



Freiluftkühler

**Vielen Dank!**

- 27.11.2015 – Burkhard Wald:  
**Über Sudoku-Rätsel und Rainbow-Looms**
- 18.12.2015 – Andreas Michels  
**Extended Minds und die IT - interdisziplinäre  
Betrachtungen zu einer spekulativen These**
- 29.01.2016 – Dominik Brands, Holger Gollan  
**HPC2@UDE - Von der Idee bis zur Inbetriebnahme**
- 26.02.2016 – Andreas Bischoff  
**Von Quadcoptern und Androiden - Aktuelles aus der  
Robotik**
- 18.03.2016 – Marius Mertens  
**Ausfallsicherheit: Fällt sicher aus**

14:00 Uhr  
Duisburg LE 105