Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
Rechenzentrum

HPC Einführungsveranstaltung

04.05.2023

HPC Einführung: Überblick

- Einleitung
  - HPC Support Team
  - HPC Dienste
  - Hochleistungsrechner: Definition und Arbeitsweise
- Vorstellung der verfügbaren HPC-Systeme
  - Lokale Installationen
    - Linux Cluster (caucluster)
    - NEC HPC-System (nesh)
  - NHR-Verbund
- Arbeiten auf HPC-Systemen
  - Accountbeantragung
  - Login und Dateisysteme
  - Software und Batchbetrieb
- Vortragsfolien:
    - https://www.rz.uni-kiel.de/de/angebote/hiperf/hpc-kurse

Ansprechpartner

- **HPC Support Team**
  - Benutzerberatung
    - Dr. Karsten Balzer
    - Dr. Michael Kisiela
    - Dr. Simone Knief
  - Systemadministration
    - Dr. Holger Naundorf

- **Mailingliste/Ticketsystem**
  - hpcsupport@rz.uni-kiel.de

Hochleistungsrechnen @ RZ CAU

- **Bereitstellung von Rechenressourcen unterschiedlicher Leistungsklassen**
- **HPC Support**

Hochleistungsrechnen @ RZ CAU

- **Bereitstellung von Rechenressourcen unterschiedlicher Leistungsklassen**
  - **lokale Hochleistungsrechner**
    - caucluster: Linux-Clustersystem
    - hybrides NEC HPC-System (nesh):
      - NEC HPC-Linux Cluster
      - NEC SX-Aurora TSUBASA
      - GPU-Komponente (NVIDIA Tesla V100 Grafikkarten)
  - **Rechnersysteme im NHR Verbund**

→Ressourcen stehen allen CAU- und GEOMAR-Angehörigen zur Verfügung

Hochleistungsrechnen @ RZ CAU

- **Bereitstellung von Rechenressourcen**
- **HPC Support**
  - Unterstützung bei Nutzung lokaler und dezentraler HPC-Ressourcen
    - Auswahl der geeigneten Rechnerarchitektur
    - Hilfe bei der Portierung und Optimierung von Programmen
      - Auswahl geeigneter Compiler und deren Optionen
      - Optimierung von Programmcodes (Algorithmenauswahl)
    - Hilfe bei Parallelisierung und Vektorisierung von Programmen
    - Installation von Benutzerprogrammen auf unseren Systemen
    - Hilfestellung bei Anfertigung von Projektanträgen für HPC-Rechner im NHR-Verbund

Hochleistungsrechner

Hochleistungsrechner: Definition

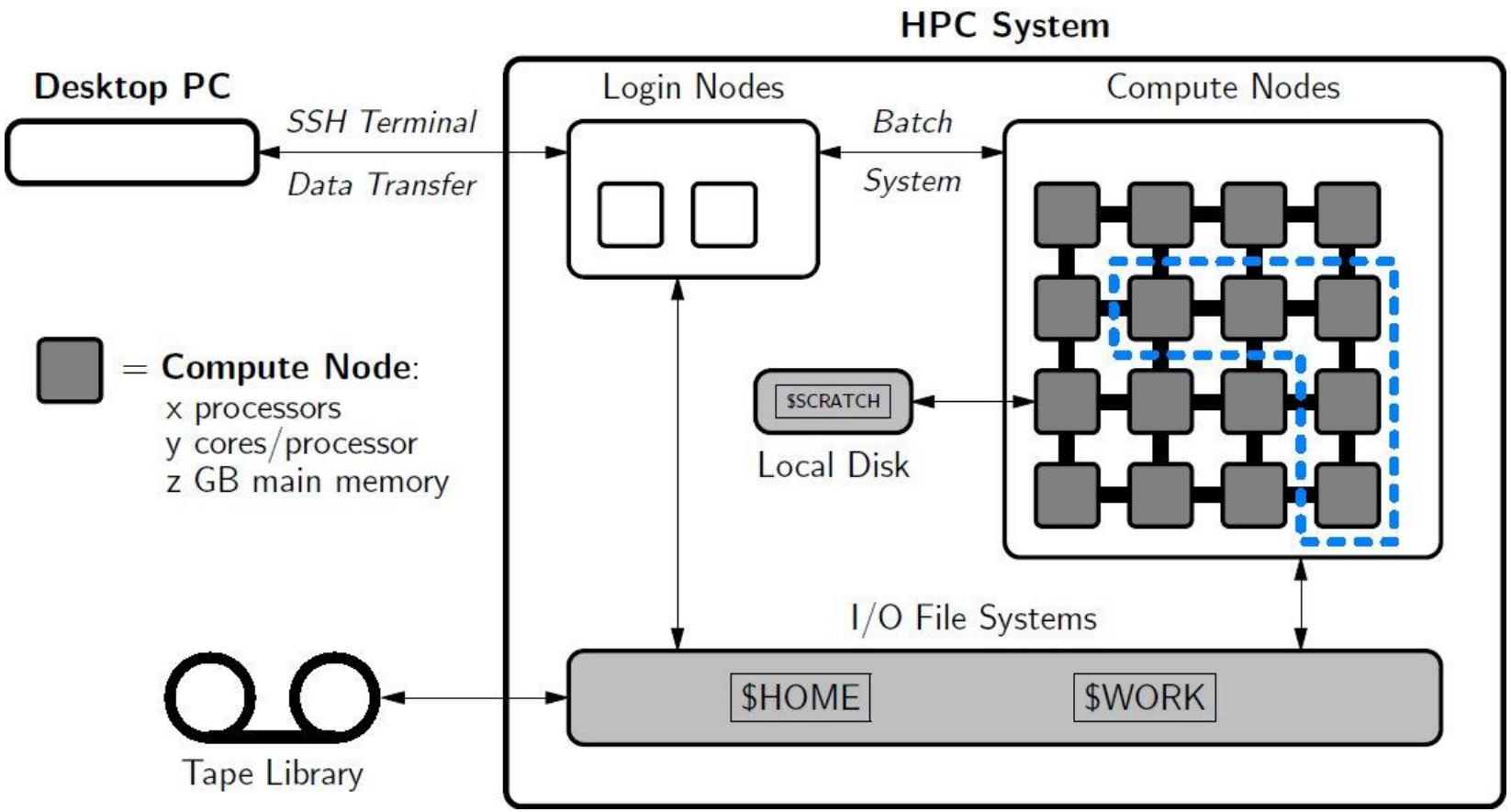
- keine eindeutige Formulierung möglich
- = computer aided computation
- Hochleistungsrechnen ist heute praktisch identisch mit parallelem Rechnen
- Architektur ist auf parallele Verarbeitung ausgerichtet
- aktuelle PCs mit Multi-Core Prozessoren (kleine Parallelrechner)
  - Leistungssteigerung ist jedoch begrenzt

Hochleistungsrechner: Definition

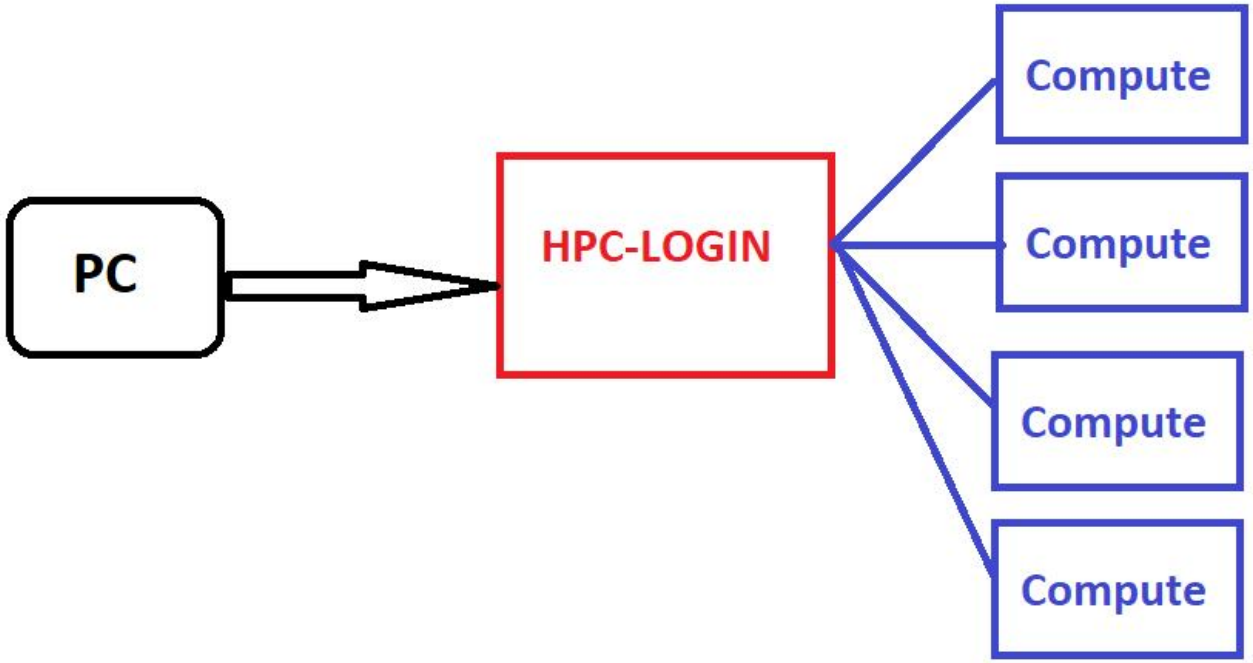
- keine eindeutige Formulierung möglich
- Hochleistungsrechnen ist heute praktisch identisch mit parallelem Rechnen
- Architektur ist auf parallele Verarbeitung ausgerichtet
- aktuelle PCs mit Multi-Core Prozessoren (kleine Parallelrechner)
  - Leistungssteigerung ist jedoch begrenzt

- Hochleistungsrechner:
  - hochparallele Rechencluster
    - große Anzahl von Rechenknoten ausgestattet mit Multi-Core CPUs
    - schnelles Verbindungsnetzwerk zwischen Rechenknoten
    - leistungsfähige I/O-Dateisysteme (für Lese- und Schreibprozesse)
  - Rechnersysteme mit einer hohen Hauptspeicherausstattung (>1TB)
  - Rechnersysteme mit spezieller Hardware/Architektur
    - z.B. Vektorrechner, Grafikkarten

HPC-Systeme (Aufbau allgemein)



HPC-Systeme (Aufbau allgemein)



Linux-Cluster (caucluster)

Linux Cluster (caucluster)

- **Hardware**
  - 2 Login-Knoten
    - AMD Epyc 73713 CPUs, 32 Cores und 512GB Memory
    - NVIDIA GPU: Quadro RTX 4000
  - 130 Batchknoten mit 4160 Cores (AMD Epyc CPUs)
    - jeweils 32 Cores, Hauptspeicher: 256GB bis 4TB
      - 16 Knoten 256GB RAM
      - 93 Knoten 512GB RAM
      - 15 Knoten 1TB RAM
      - 5 Knoten 2TB RAM
      - 1 Knoten 4TB RAM

caucluster

- **Betriebssystem**
  - Rocky Linux 8.6
- **Dateisysteme**
  - HOME-Verzeichnis
    - 85TB für alle Nutzer (ZFS-Dateisystem)
  - WORK-Verzeichnis
    - 1,2PB BeeGFS paralleles Dateisystem
  - Ceph-Verzeichnis
- **Batchsystem**
  - SLURM Workload Manager
    - **S**imple **L**inux **U**tility for **R**esource **m**anagement)
  - Resourcenverteilung über Fair-Share Algorithmus
  - Fair-Share ≠ First In – First Out (FiFO)
    - Berücksichtigung von Core- und Hauptspeichernutzung

Hybrides NEC HPC-System

NEC HPC-System (nesh)

- **Hybrides HPC-System**
  - skalarer NEC HPC-Linux Cluster
  - NEC SX-Aurora TSUBASA
  - GPU Subsystem
- Einheitliche Systemumgebung
  - gemeinsame Vorrechner *(HPC-Login)*
  - globale (gemeinsame) Dateisysteme für $HOME und $WORK
  - ein gemeinsames Batchsystem: SLURM
  - Ressourcenverteilung über Fair-Share Algorithmus

→ kein Datentransfer für die Nutzung unterschiedlicher Hardwarearchitekturen erforderlich

NEC HPC-System

- 4 gemeinsame Vorrechner *(HPC-Login)*
  - Skylake-SP Prozessoren (2,1GHz)
  - 32 Cores pro Knoten und 768GB Hauptspeicher
  - Login-Name: nesh-fe.rz.uni-kiel.de

  - interaktives Arbeiten sowie Pre- und Postprocessing

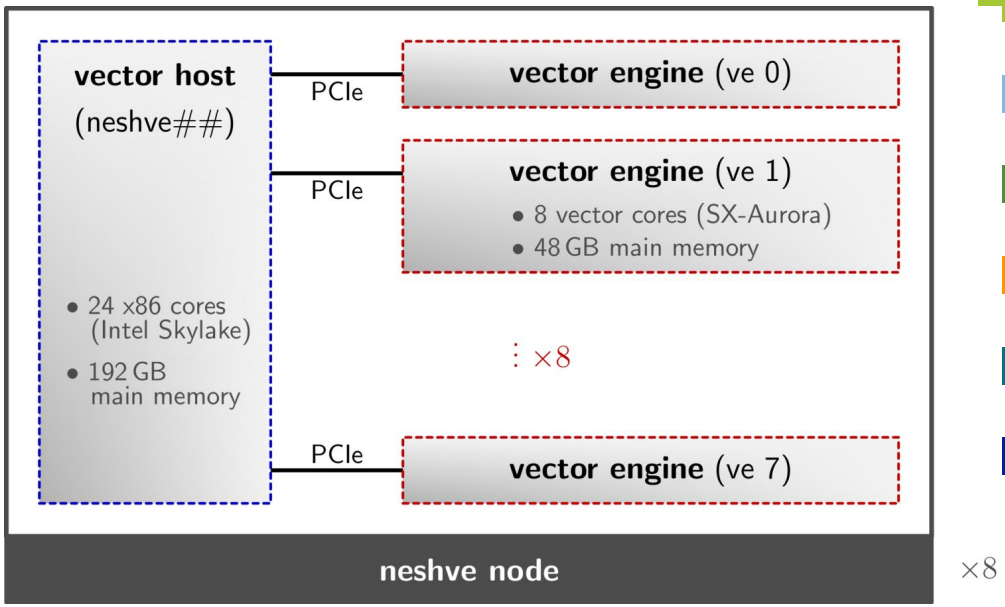
NEC HPC-Linux Cluster

- 464 Knoten mit insgesamt 14848 Cores *(Compute)*
  - 284 Knoten mit jeweils
    - 2 Intel Xeon Gold 6226R (Cascade Lake): 32 Cores pro Knoten und 192 GB Hauptspeicher bzw. 1.5TB (4 Knoten)
  - 180 Knoten mit jeweils
    - 2 Intel Xeon Gold 6130 (Skylake-SP): 32 Cores pro Knoten und 192 GB Hauptspeicher bzw. 384GB (8 Knoten)
  - Batchknoten mit schnellem EDR-InfiniBand vernetzt
    - Übertragungsrate: 100Gbit/s
  - 2 Data-Mover-Knoten
    - Intel Xeon Silver 4214 (Cascade Lake): 24 cores, 192GB RAM
    - Zugriff auf alle Dateisysteme ($HOME,$WORK,$CEPH) und Internet
      - interaktiv oder über spezielle Batchpartition data
  - Betriebssystem: Red Hat Enterprise Linux (Release 8.2)
  - Batch-Knoten *(Compute)* nur über Batchsystem erreichbar, kein interaktives Einloggen

NEC SX-Aurora TSUBASA

- **NEC SX-Aurora TSUBASA**
  - 8 Vektorhosts (VH) mit jeweils:
    - 8 Vektor-Engines (VE, Vektor-Karten) mit jeweils 8 Vektor-Cores, 48 GB Speicher, 64 logische Vektor-Register pro Core (Länge 256 x 64 Bits)
    - VE-Anbindung an Vektorhost über PCIe
    - 1,2 TB/s Speicherbandbreite

→512 SX-Aurora Vektor-Cores



GPU Subsystem

- 2 Knoten ausgestattet mit jeweils
  - GPU-Host
    - 2 Intel Xeon Gold 6226R (Cascade Lake): 32 Cores,192GB RAM
  - 4 NVIDIA Tesla V100 GPU-Karten
    - 5120 NVIDIA CUDA Cores und 32GB GPU RAM
    - 900GB/s Speicherbandbreite

NEC HPC-System

- **Betriebssystem**
  - Red Hat Enterprise Linux (Release 8.2)
- **Dateisysteme**
  - HOME-Verzeichnis
    - 300TB NEC GxFS
  - WORK-Verzeichnis
    - 10 PB NEC GxFS (2 Partitionen mit je 5 PB)
  - Zugriff auf ein Ceph-Dateisystem
- **Batchsystem**
    - SLURM Workload Manager
      - **S**imple **L**inux **U**tility for **R**esource **m**anagement
    - Ressourcenverteilung über Fair-Share Algorithmus

Rechnersysteme im NHR-Verbund

- Verbund für **N**ationales **H**ochleistungs**r**echnen
- besteht seit 2021
- Zusammenschluss 9 Hochschulrechenzentren in Deutschland
  - RWTH Aachen, TU Dresden, TU Darmstadt, Uni Erlangen, KIT, Uni Paderborn, NHR Süd-West (Uni Frankfurt/Main, TU Kaiserslautern, Uni Mainz, Uni des Saarlandes)
  - GWDG Göttingen (NHR@GWDG)
  - Zuse-Zentrum Berlin (NHR@ZIB)
- https://www.nhr-verein.de

NHR@ZIB / NHR@GWDG

- **Berlin (Lise)**
  - 1.270 Knoten (121.920 Cores)
    - 1.236 Knoten, 384GB RAM
    - 32 Knoten, 768GB RAM
    - 2 Knoten, 1,5TB RAM
    - 2 Intel Cascade Lake CPUs
      - 48 Cores/CPU
  - Intel Omni-Path Vernetzung

- **Göttingen (Emmy)**
  - 974 Knoten (93.504 Cores)
    - 956 Knoten, 384GB RAM
    - 16 Knoten, 768 GB RAM
    - 2 Knoten, 1.5TB RAM
    - 2 Intel Cascade Lake CPUs
      - 48 Cores/CPU
  - 448 Knoten (17.920 Cores)
    - 432 Knoten, 192GB RAM
    - 16 Knoten 768GB RAM
    - 2 Intel Skylake CPUs
      - 20 Cores pro CPU
  - 33 GPU Knoten
    - 4 NVIDIA Tesla A100 (40GB) Grafikkarten
    - 2 AMD Epyc CPUs


Lise
HLRN
Lise

Hochleistungsrechnen @ RZ CAU

- **Arbeiten auf unseren lokalen HPC-Systemen**
  - Accountbeantragung
  - Einloggen und Datentransfer
  - Dateisysteme und Datensicherung
  - Compiler und Software
  - Interaktives Arbeiten und Batchbetrieb

HPC-Systeme: Zugang

- Rechnerzugang kann jederzeit beantragt werden
- Formular 3: Antrag auf Nutzung eines Hochleistungsrechners
  - https://www.rz.uni-kiel.de/de/ueber-uns/dokumente/formulare/anmeldung/form3.pdf
  - ausgefüllt an die RZ-Benutzerverwaltung schicken
    - https://www.rz.uni-kiel.de/de/ueber-uns/dokumente/formulare/anmeldung/rz-antraege-waehrend-corona

- mit Accounteintragung: Aufnahme in 2 Mailinglisten
  - nesh_user@lists.uni-kiel.de bzw. caucluster_user@lists.uni-kiel.de
    - rechnerspezifische Informationen:
      - Betriebsunterberechnungen, Probleme, neue Software, …
  - hpc_user@uni-kiel.de
    - allgemeine Informationen
      - Kurse, Infoveranstaltung, Rechnerbeschaffungen, …

HPC-Systeme: Antrag I

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Rechenzentrum

Rechenzentrum der Universität Kiel

Formular 3 / 2019-11

Hochleistungsrechner

(Formular darf selbst ausgedruckt und vervielfältigt werden; mit der Unterschrift wird immer das Original im RZ anerkannt!)

Antrag auf Nutzung eines Hochleistungsrechners

☐ **NEC Hochleistungsrechnersystem**
(NEC SX-Aurora TSUBASA und NEC HPC-Linux-Cluster)

☐ **Linux-Cluster** (caucluster)

1. Allgemeine Angaben (Bitte leserlich in Druckbuchstaben ausfüllen)

Einrichtung / Abteilung: _____

Führen Sie Ihr Projekt im Rahmen eines Exzellenzclusters durch? : Nein ☐ Ja ☐

Wenn ja, für welches Exzellenzcluster ? : _____

Verantwortliche(r) Leiter/in des Projekts : _____ Tel. : _____

Nutzer/in : _____ Tel. : _____

Nutzerkennzeichen (soweit vorhanden) : _____

E-Mail-Adresse: _____

Aus Drittmitteln finanziertes Projekt; bitte Fördernummer angeben : _____

HPC-Systeme: Antrag II

2. Personenbezogene Daten

Die Verarbeitung **personenenbezogener Daten** (Einzelangaben über persönliche oder sachliche Verhältnisse einer bestimmten oder bestimmbaren natürlichen Person) unterliegt den Datenschutzgesetzen des Bundes sowie des Landes Schleswig-Holstein. Die Speicherung oder auch Verarbeitung personenbezogener Daten auf den Hochleistungsrechnern der CAU ist ausschließlich für Forschungszwecke zulässig, wenn die Daten dort bereits in anonymisierter oder pseudonymisierter Form vorliegen. Die Unterzeichnenden bestätigen durch ihre Unterschrift:

- ☐ Mit dem hier beantragten Account werden auf den HPC-Systemen keinerlei personenbezogene Daten gespeichert oder weiter verarbeitet.
- ☐ Mit dem hier beantragten Account werden auf den HPC-Systemen zu Forschungszwecken personenbezogene Daten verarbeitet, die auf separaten Systemen zuvor vollständig anonymisiert wurden. Die Beziehungen zwischen einzelnen Datensätzen und den jeweils zugehörigen, natürlichen Personen wurden vernichtet und können nicht wiederbeschafft werden.
- ☐ Mit dem hier beantragten Account werden auf den HPC-Systemen zu Forschungszwecken personenbezogene Daten verarbeitet, die auf separaten Systemen zuvor vollständig pseudonymisiert wurden. Das komplette Pseudonymisierungsverfahren ist vollständig dokumentiert und der/dem Datenschutzbeauftragten auf Anfrage auszuhändigen. Weder die Pseudonymisierungsschlüssel noch die Dokumentation des Pseudonymisierungsverfahrens selbst sind auf den HPC-Systemen der CAU gespeichert.

HPC-Systeme: Antrag III

3. Kurzbeschreibung des Lehr-/Forschungsprojektes

_____

_____

_____

4. Ressourcen-Anforderungen des Projektes

Welche speziellen Softwareprodukte sind für die Durchführung des Projektes erforderlich?

_____

5. Allgemeine Informationen

- Grundlage für die Nutzung des Rechenzentrums ist die **Benutzungsrahmenordnung** für die Kommunikations- und Datenverarbeitungsinfrastruktur der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel (siehe *https://www.rz.uni-kiel.de/de/ueber-uns/dokumente/benutzungsrahmenordnung.pdf*) .
- Die zu bearbeitenden Aufgaben werden finanziert aus Mitteln der Hochschule/angegliederten Einrichtungen oder aus Zuwendungen der DFG. Bei allen anderen Finanzierungen ist die schriftliche Genehmigung des Rechenzentrums erforderlich.
- **Die Nutzungserlaubnis gilt bis 15. Februar des folgenden Jahres. Bei Abmeldung oder bei Nichtverlängerung werden die Daten auf allen Plattenspeichern und Magnetbandkassetten nach 6 Monaten gelöscht.**
- Die in diesem Antrag angegebenen persönlichen Daten werden elektronisch gespeichert und verarbeitet. Mit der Unterschrift wird dazu das Einverständnis erklärt.

HPC-Systeme: Antrag IV

Die Unterzeichnenden erkennen die folgenden Auflagen an:

- Die umseitig genannten Rechner gelten als Dual-Use-Technologie. Ihre Nutzung unterliegt Einschränkungen, die sich aus EU-Recht sowie aus dem Außenwirtschaftsgesetz (AWG) und der Außenwirtschaftsverordnung (AWV) ergeben. Die Unterzeichnenden bestätigen durch ihre Unterschrift, dass die diesbezüglich geltenden Exportbeschränkungen des Bundesamtes für Ausfuhrkontrolle eingehalten werden (siehe *http://www.ausfuhrkontrolle.info/ausfuhrkontrolle/de/embargos/uebersicht/index.html).*
- Eine Nutzungsberechtigung beschränkt sich auf die unter "Nutzer/in" genannte Person. Es ist nicht erlaubt anderen, z.B. durch Preisgabe des Passworts, über den zugeteilten Login Namen einen Zugang zu den entsprechenden Rechnern zu ermöglichen.
- Bei Nichtbeachtung dieser Bestimmungen ist der betreffende Benutzer (natürliche oder juristische Person) in vollem Umfang schadenersatzpflichtig.

6. Unterschriften:

(Institutsstempel)

Kiel, den _____ , _____ (verantwortlicher Leiter/in)

Kiel, den _____ , _____ (Nutzer/in)

Kiel, den _____ , _____ (Geschäftsführende(r) Direktor/in der Einrichtung bzw. bei Anträgen aus dem GEOMAR: Leiter/in RZ GEOMAR)

Zugang NHR-Systeme

- Nutzung für alle Mitarbeiter der Universitäten und Hochschulen möglich
- 2 Phasen der Rechnernutzung
  - Beantragung einer Schnupperkennung
  - Beantragung eines Großprojektes

Schnupperkennung

- Beantragung ist jederzeit möglich (WWW-Formular)
- begrenzte Laufzeit von 3 Quartalen
- dient zur Vorbereitung eines Großprojektes
- begrenztes Kontingent an Rechenzeit:
  - 75.000 Core-Stunden pro Quartal (erweiterbar auf 300.000 Core-Std.)

NHR Großprojekt

- dient zur Durchführung von größeren Forschungsvorhaben
- Antragsfrist jeweils 3 Monate vor Laufzeitbeginn (1.01., 1.04., 1.07.,1.10.)
- Kontingente werden jeweils für ein Jahr bewilligt und quartalsweise zugeteilt
- Angaben, die für einen Antrag erforderlich sind:
  - Kurzbeschreibung des Projektes bzw. Statusbericht
  - nachvollziehbare Abschätzung der benötigten Betriebsmittel
    - Rechenzeit, Hauptspeicher, Plattenspeicherbedarf
  - https://www.nhr-verein.de/rechnernutzung

Nutzung unserer lokalen HPC-Systeme

HPC-Systeme: Zugang

- **interaktives Einloggen nur auf Vorrechner (Login-Knoten) möglich**
  - direkter Zugriff nur über IP-Adressen aus dem CAU- und GEOMAR-Netz bzw. UKSH-Netz
  - Zugriff aus anderen Netzen nur über eine VPN-Verbindung
    - VPN-Verbindung mit su- bzw. smomw-Kennung aufbauen (nicht mit stu-Account)

- **Aufbau einer ssh-Verbindung über ssh-Client vom lokalen PC aus:**
  - MAC und Linux: ssh-Client in Standarddistributionen enthalten
  - Windows-Clients:
    - putty:
      - http://www.putty.org/
      - kein Arbeiten mit einer grafischen Benutzeroberfläche möglich
    - Windows ssh command line tool cmd:
      - [Windows+R] Tastenkombination; kein Arbeiten mit GUI
    - MobaXterm:
      - https://mobaxterm.mobatek.net/
    - SmarTTY:
      - http://smartty.sysprogs.com/ (ssh client mit scp Möglichkeit)

HPC-Systeme: Zugang

- Zugriff auf Login-Knoten NEC HPC-System
  - ssh –X username@nesh-fe.rz.uni-kiel.de
  - -X Option aktiviert X11-Forwarding
    - Nutzung einer grafischen Benutzeroberfläche
- Zugriff auf caucluster Login-Knoten
  - ssh –X username@caucluster.rz.uni-kiel.de
- *ssh-Kommando auf lokalem PC ausführen*

HPC-Systeme: Datentransfer

- **Linux und MAC:**
  - scp-Kommando:
    - scp *dateiname* username@nesh-fe.rz.uni-kiel.de:/verzeichnisname
  - rsync-Kommando:
    - rsync -av *dateiname* username@nesh-fe.rz.uni-kiel.de:/verzeichnisname

- **Windows:**
  - WinSCP (grafischer scp-Client)
    - https://winscp.net/eng/docs/lang:de
    - SmarTTY:
      - http://smartty.sysprogs.com/ (ssh client mit scp Möglichkeit)
- *scp-, rsync-Kommando bzw. WinSCP-Aufruf auf lokalem PC ausführen*

HPC-Systeme: Editoren

- **Verfügbare Editoren auf HPC-Systemen** *(Vorrechner, HPC-Login)*
  - vi
  - Emacs
  - nedit
  - nano

- **Arbeiten mit Dateien, die unter Windows erzeugt/bearbeitet wurden**
  - nur als reine ASCII-Dateien abspeichern auf lokalem PC
  - vermeidet Fehlermeldung
    - /bin/bash^M: bad interpreter: no such file or directory
  - Kommando dos2unix dateiname → entfernt Steuerzeichen
    - dos2unix-Kommondo auf Vorrechner (HPC-Login) ausführen

HPC-Systeme: Passwörter

- Benutzerkennung erhalten Sie per E-Mail
- Passwortverwaltung über das CIM-Portal
  - https://cim.rz.uni-kiel.de/cimportal
- Setzen eines Wunschpasswortes vor dem ersten Einloggen
- Passwortänderungen auch über das CIM-Portal

Dateisysteme
und
Datensicherung

HPC-Rechner: Dateisysteme

- Vier verschiedene Dateisysteme nutzbar
  - HOME-Verzeichnis
  - WORK-Verzeichnis
  - lokaler Plattenplatz an den Rechenknoten
  - Zugriff auf ein CEPH-Dateisystem

HOME-Verzeichnis

- Login-Verzeichnis
- erreichbar über die Umgebungsvariable $HOME
- verfügbarer Plattenplatz (für alle Nutzer)
  - NEC HPC-System: 300TB
  - caucluster: 85TB
- global verfügbar an allen Knoten
- tägliche Datensicherung durch das Rechenzentrum
- Quoten für nutzbaren Plattenplatz pro Benutzer
- Verzeichnis für wichtige Daten, die gesichert werden müssen
  - Skripte, Programme und kleinere Ergebnisdateien
- nicht für die Durchführung von Batchjobs verwenden
  - u.a. langsame Zugriffszeiten

Work-Verzeichnis

- globales paralleles Dateisystem
- Dateisystem für die Durchführung von Batchberechnungen
- erreichbar über
  - $WORK-Umgebungsvariable
- keine Datensicherung durch das Rechenzentrum
- verfügbarer Plattenplatz (für alle Nutzer insgesamt)
  - NEC HPC-System: 10 PB GxFS
  - caucluster: 1,2 PB BeeGFS
- Quoten für nutzbaren Plattenplatz pro Benutzer

$WORK: Plattenplatzkontingent

- **NEC HPC-System**
  - $WORK Standardkontingente
    - Nutzbarer Speicherplatz
      - Softlimit: 1.8TB (CAU) bzw. 4.5TB (GEOMAR)
      - Hardlimit: 2.0TB (CAU) bzw. 5.0TB (GEOMAR)
    - $HOME Standardkontingent
      - Nutzbarer Speicherplatz: 150GB Soft- und 200GB Hardlimit
- **caucluster**
  - $WORK Standardkontingent:
    - Speicherplatz: 2TB
  - $HOME Standardkontingent:
    - Speicherplatz: 100 GB Hardlimit
  - Kommando zur Quotenabfrage: workquota

Plattenplatzkontingent: workquota I


```
[suabc012@nesh-fe2 ~]$ workquota
*******************************************************************************
* Your current quota on $HOME=/gxfs_home/cau/suabc012                         *
*                          [used] |      [soft]  |      [hard] | [grace]  |  [files]  |  *
* disk space          10.125G |  150.000G |  200.000G  |           |     353  |  *
*******************************************************************************
* Your current quota on $WORK=/gxfs_work1/cau/suabc012                        *
*                          [used] |      [soft]  |    [hard]   | [grace] |  [files]   |  *
* disk space (fs2)     1.100M |    1.953T  |     2.148T |           |       34  |  *
*******************************************************************************
Use 'workquota --raw' to see native gxfs quota information
```

Plattenplatzkontingent: workquota II


```
[suabc012@nesh-fe2 ~]$ workquota
*****************************************************************************************
* Your current quota on $HOME=/gxfs_home/cau/suabc012                                   *
*                          [used] |      [soft]  |      [hard] | [grace]  |    [files]  |  *
* disk space          10.125G |  150.000G |  200.000G  |           |      353  |  *
*****************************************************************************************
* Your current quota on $WORK=/gxfs_work1/cau/suabc012                                  *
*                          [used] |      [soft]   |    [hard]    | [grace] |  [files]    |  *
* disk space (fs2)    2.010T |   1.953T   |     2.148T |        6  |      4524 |  *
*****************************************************************************************
Use 'workquota --raw' to see native gxfs quota information
```

Plattenplatzkontingent: workquota II


```
[suabc012@nesh-fe2 ~]$ workquota
*****************************************************************************************
* Your current quota on $HOME=/gxfs_home/cau/suabc012                                   *
*                          [used] |      [soft]  |      [hard] | [grace]   |   [files]   |  *
* disk space          10.125G |  150.000G |  200.000G  |           |      353   |  *
*****************************************************************************************
* Your current quota on $WORK=/gxfs_work1/cau/suabc012                                  *
*                          [used] |      [soft]   |    [hard]    |  [grace] |   [files]    |  *
* disk space (fs2)    2.300T |    1.953T   |      2.148T |  expired |      6134  |  *
*****************************************************************************************
Use 'workquota --raw' to see native gxfs quota information
```

Lokaler Plattenplatz

- erreichbar über Umgebungsvariable
  - $TMPDIR
- lokaler temporärer Plattenplatz am jeweiligen Batchknoten
- nur innerhalb eines Batchjobs verfügbar
- schnelle Zugriffszeiten: wichtig für I/O intensive Berechnungen (viele Lese- und/oder Schreibprozesse in kurzer Zeit)

CEPH-Dateisystem

- erreichbar über
  - Umgebungsvariable $CEPH
- Default Quota: 2 TB
- nur lokal auf Vorrechnern verfügbar
- Speicherung von aktuell nicht benötigten Daten
  - erstellen von tar-Dateien

Datensicherung

- **HOME-Verzeichnis**
  - tägliche Sicherung
  - Datensicherungen werden 8 Wochen aufbewahrt
  - für die letzten 2 Wochen ist eine tagesaktuelle Wiederherstellung möglich
  - ältere Datensicherungen stehen in Wochenabständen zur Verfügung
- **$WORK:**
  - keine Sicherung durch das Rechenzentrum
- **$CEPH:**
  - keine Sicherung durch das Rechenzentrum
- Daten nur verfügbar solange ein Account aktiv ist
- keine Langzeitarchivierung durch das Rechenzentrum

Arbeiten mit den Dateisystemen

- wichtige Daten, die gesichert werden müssen auf $HOME
- Batchberechnungen
  - starten und Ausführen auf $WORK
  - Nutzung von $TMPDIR für I/O intensive Berechnungen
- $CEPH-Verzeichnis
  - Verzeichnis für aktuell nicht benötigte Daten
  - bevorzugt große Datenpakete abspeichern
- eigenen Datenbestand von Zeit zu Zeit überprüfen

Anwendersoftware und Programmübersetzung

HPC-Rechner: Software

- **Compiler**
  - Gnu-Compiler
  - Intel-Compiler
  - SX-Crosscompiler für Nutzung der NEC SX-Aurora TSUBASA Knoten
  - NVIDIA Cuda Toolkit für GPU Nutzung
- **MPI-Implementierung**
  - Intel-MPI, OpenMPI (Linux-Cluster)
  - spezielles SX-MPI (für SX-Aurora TSUBASA)
- **Bibliotheken**
  - netCDF, HDF5, FFTW, MKL, PETSc …
- **Anwendersoftware:**
  - Python, Perl, R, Matlab, Gaussian, Turbomole, ….

→ Bereitstellung über ein Module-Konzept

Module-Konzept

- ermöglicht Nutzung bereits global installierter Software
- Softwareverzeichnis nicht im Standardsuchpfad
- nach dem Laden eines Softwaremodules:
  - Programm ohne weitere Pfadanpassungen nutzbar
- einfaches Setzen/Umsetzen von Suchpfaden:
  - $PATH, $LD_LIBRARY_PATH, $MANPATH

Modules: Kommandos

- **module avail**
  - liefert Überblick über bereits installierte Softwarepakete
- **module load *name***
  - lädt Module mit dem Name name; alle Einstellungen für die Programmnutzung werden vorgenommen
- **module list**
  - listet alle Module auf, die aktuell geladen sind
- **module unload *name***
  - entfernt das Module *name*, d.h. alle Einstellungen werden rückgängig gemacht
- **module purge**
  - entfernt alle bisher geladenen Module, d.h. module list Kommando liefert keine Einträge mehr
- **module show *name***
  - zeigt Pfadänderung an, die das Module durchführt

Modules (NEC HPC-System): Software I

[szrzs112@nesh-fe1 ~]$ **module avail**

---------- /gxfs_home/sw/modules/cluster-compilers ----

…

---------- /gxfs_home/sw/modules/cluster-libraries --------

…

---------- /gxfs_home/sw/modules/cluster-software ------

….

---------- /gxfs_home/sw/modules/cluster-tools ----------

…

---------- /gxfs_home/sw/modules/gpu ----------

….

---------- /gxfs_home/sw/modules/vector ----------

Modules (NEC HPC-System): Software II


```
[szrzs112@nesh-fe1 ~]$ module avail
------------------------------------------------ /gxfs_home/sw/modules/cluster-compilers ------------------------------
   gcc/9.3.0                          intel/19.0.4          intelmpi/20.0.4       (D)    openmpi-intel20/3.1.6
   gcc/10.2.0                   (D)   intel/20.0.4    (D)   llvm/11.0.0                  openmpi/3.1.6
   intel-parallel-studio/20.0.4       intelmpi/19.0.4       openmpi-intel19/3.1.6
------------------------------------------------ /gxfs_home/sw/modules/cluster-libraries ----------------------------
   boost-intel/1.74.0     fftw-intel/3.3.9       hdf5-intel/1.10.7       libxml2/2.9.10      netcdf-fortran-
     intel/4.5.3
   boost/1.74.0           fftw/3.3.9             hdf5-intel/1.12.0 (D)   libxtst/1.2.2       netcdf-fortran/4.5.3
   bzip2/1.0.8            glpk/4.65              hdf5/1.10.7test         mpfr/4.1.0          netlib-lapack/3.8.0
   curl/7.72.0            gmp/6.2.1              hdf5/1.12.0       (D)   netcdf-c-intel/4.7.4      readline/6.3
   eigen-intel/3.3.8      gsl-intel/2.5          libaec/1.0.2            netcdf-c/4.7.4      sbml/5.18.0
   eigen/3.3.8            gsl/2.5                libszip/2.1.1           netcdf-cxx4-intel/4.3.1   xz/5.2.5
   expat/2.2.10           hdf5-intel/1.10.7test  libxc/5.0.0             netcdf-cxx4/4.3.1         zlib/1.2.11
```

Modules NEC HPC.System: Software III


```
------------------------------------------------ /gxfs_home/sw/modules/cluster-software ------------------------------------------------
   R/info                  gnuplot/5.2.8           ncview/2.1.8                  petsc-intel/3.14.4 (D)
   R/4.0.2          (D)    imagemagick/7.0.8-7     octave/5.2.0                  python/info
   asymptote/2.68          julia/1.5.2             octopus/6.0                   python/2.7.18
   blast-plus/2.9.0        lammps/20181207         octopus/7.3                   python/3.7.9
   bowtie2/2.4.2           matlab/2018b            octopus/10.0          (D)     python/3.8.6       (D)
   cdo/1.9.9               matlab/2019b            openbabel/3.0.0               samtools/1.10
   cp2k/7.1                matlab/2020b       (D)  openfoam/8                    singularity/3.5.2
   esmf/7.1.0r             matlab_geomar/2018b     openjdk/11.0.2                singularity/3.6.4  (D)
   espresso/6.6            matlab_geomar/2019b     perl/info                     tcl/8.6.10
   ferret/7.2              matlab_geomar/2020b (D) petsc-debug-intel/3.6.1       turbomole/7.5
   flex/2.6.4              miniconda2/4.8.3        petsc-debug-intel/3.7.6       turbomolempi/7.5
   g16/a03                 miniconda3/4.9.2        petsc-debug-intel/3.14.4 (D)  turbomolesmp/7.5
   ghostscript/9.50        ncl/6.6.2               petsc-intel/3.6.1
   gmt/6.1.0               nco/4.9.3               petsc-intel/3.7.6
```

Modules NEC HPC-System: Software IV


```
------------------------------------ /gxfs_home/sw/modules/cluster-tools ----------------------------------
   autoconf/2.69      emacs/27.1        lftp/4.9.2       openssh/8.4p1        texinfo/6.5
   automake/1.16.3    gdb/9.2           libtool/2.4.6    parallel/20200822    texlive/20200406
   cmake/3.18.4       git-lfs/2.11.0    mc/4.8.23        pigz/2.4
   ed/1.4             git/2.29.0        nano/4.9         subversion/1.14.0
---------------------------------------- /gxfs_home/sw/modules/gpu ----------------------------------------
   cuda/11.1.0    cudnn/8.0.4.30-11.1    cutensor/1.2.2
--------------------------------------- /gxfs_home/sw/modules/vector ---------------------------------------
   ncc/3.1.0    necmpi/2.11.0    necnlc/2.1.0    szip-ve/2.1.1    vetop/1.0    zlib-ve/1.2.11
  Where:
   D:  Default Module
Use "module spider" to find all possible modules and extensions.
Use "module keyword key1 key2 ..." to search for all possible modules matching any of t
```

Modules: Beispiele

- **Nutzung Programmpaket Matlab**
  - module load matlab/2020b (CAU-Nutzer)
  - module load matlab_geomar/2020b (GEOMAR-Nutzer)
  - Programmaufruf mit Kommando matlab –nodisplay starten
- **Programmübersetzung mit Intel-Compiler**
  - module load intel/20.0.4 (Compileraufruf: ifort, icc oder icpc)
  - module load intel/20.0.4 intelmpi/20.0.4
    - Compileraufruf: mpiifort, mpiicc oder miicpc
- **Programmübersetzung SX-Aurora TSUBASA**
  - module load ncc/3.1.0 (Compileraufruf: nfort, ncc oder n++)
- **Programmübersetzung GPU NVIDIA Karten**
  - module load cuda/11.1.0 (compileraufruf: nvcc)

Modules caucluster


```
[szrzs112@caucluster1 ~]$ module avail

---------------------------------------- /zfshome/sw/modules/default-env ---------
   default-env/info    matlab/R2022a    micromamba/1.3.1

---------------------------------------- /zfshome/sw/modules/compiler-env -------
   compiler-env/info    gcc12-env/12.1.0    gcc8-env/8.5.0    intel2021-
    env/2021.6.0
```

Modules caucluster

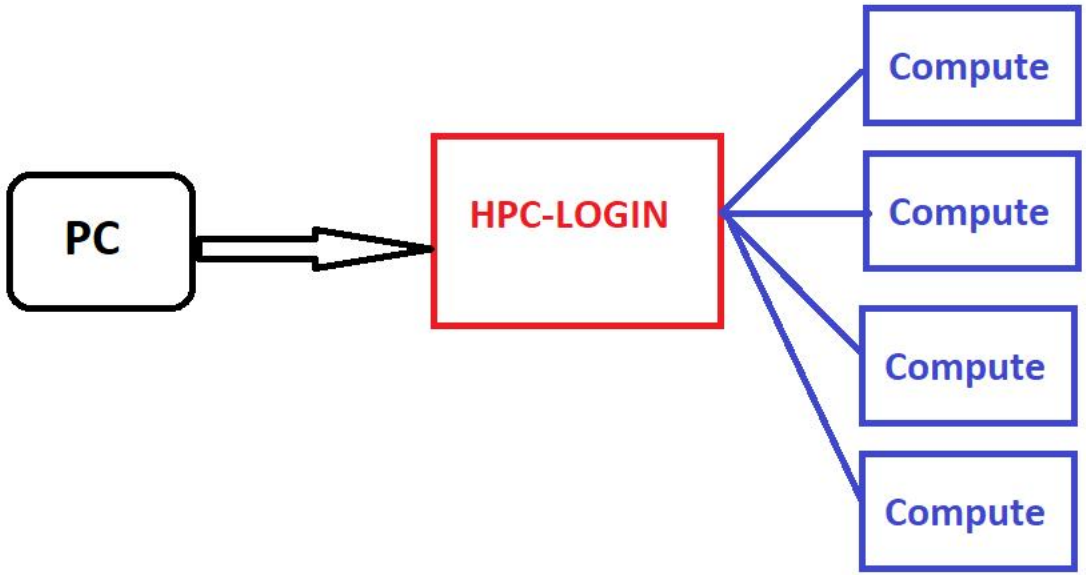

```
[szrzs112@caucluster1 ~]$ module load gcc12-env/12.1.0
[szrzs112@caucluster1 ~]$ module avail
---------------------------------------- /zfshome/sw/modules/default-env ---------------
   default-env/info    matlab/R2022a    micromamba/1.3.1
---------------------------------------- /zfshome/sw/modules/compiler-env -------------
   compiler-env/info    gcc12-env/12.1.0 (L)    gcc8-env/8.5.0    intel2021-env/2021.6.0
---------------------------------------- /zfshome/sw/modules/gcc12-env/12.1.0 ---------------------
   R/4.0.0                          git-lfs/3.2.0          openblas/0.3.20
   R/4.2.1-with-intel-mkl-2022.1.0        git/2.38.1              openjdk/11.0.15_10
   R/4.2.1-with-openblas-0.3.20           glpk/4.65               openjdk/16.0.2
     (D)
   R/4.2.1                      (D)    gmp/6.2.1               openmpi/4.1.3
   asymptote/2.83                      gmt/6.2.0               openssh/9.0p1
```

Modules caucluster

- **Kommando: module all**
  - liefert Überblick über alle bereits installierte Softwarepakete

Interaktives Arbeiten
und
Batchbetrieb

HPC-System



Arbeiten auf den HPC-Systemen

- **Interaktives Arbeiten**
  - nur auf auf den Login-Knoten (HPC-Login)
  - Datentransfer: PC ↔ HPC-Login ↔ CEPH
  - Programmübersetzung, kurze Testberechnungen
  - Erstellung der Batchskripte
  - Abgabe und Kontrolle von Batchjobs
  - keine längeren Berechnungen → über Batchsystem

- **Batchbetrieb**
  - Berechnungen werden auf den Compute-Knoten ausgeführt
  - kein direkter Zugriff auf ausführende Knoten

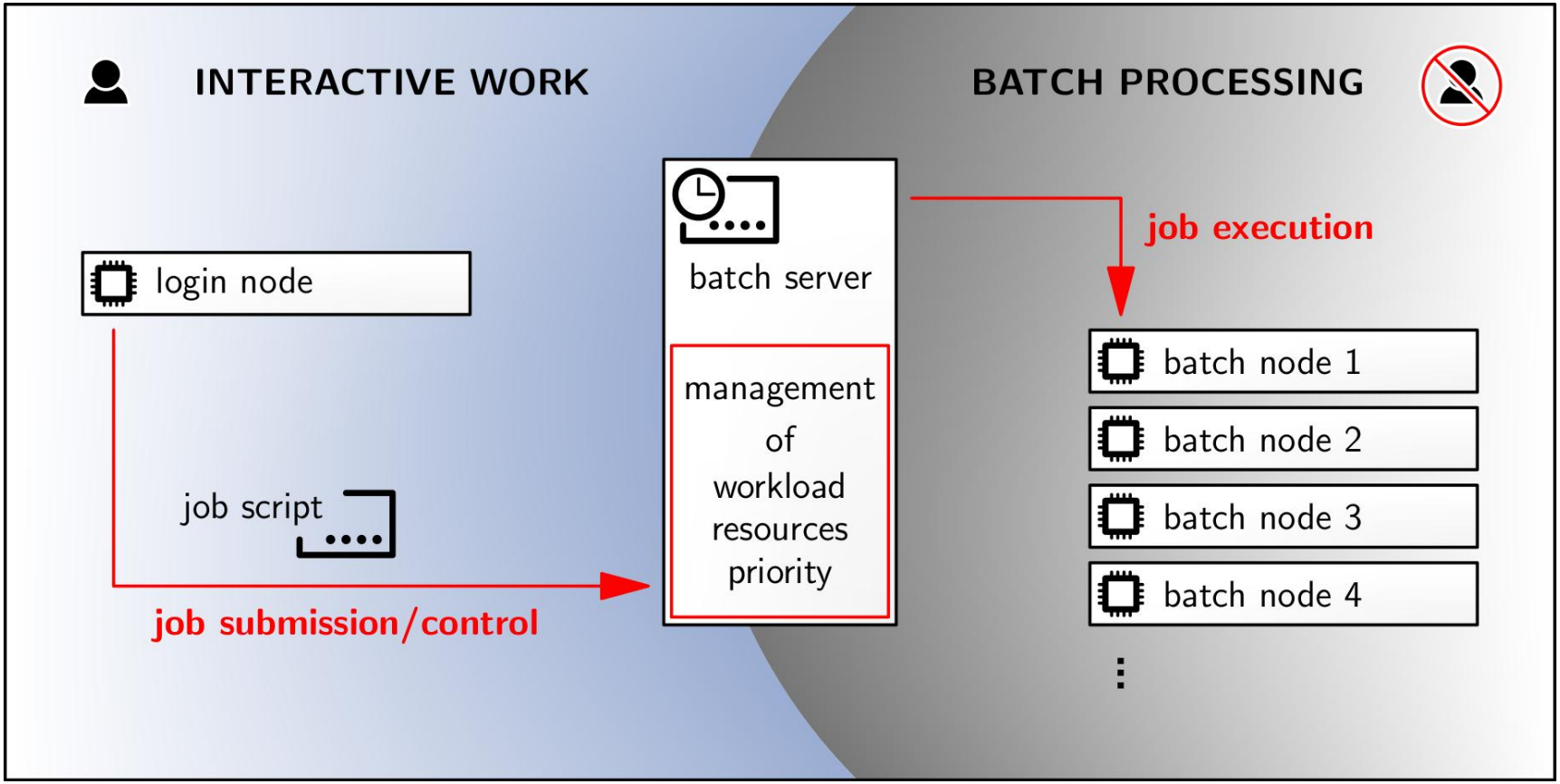
HPC-Systeme: Batchbetrieb

- **Vorteil**
  - Rechenressourcen können effektiver genutzt werden
    - höherer Durchsatz
    - gerechte Verteilung auf alle Benutzer
    - jeder Benutzer kann mehrere Berechnungen gleichzeitig ausführen
  - angeforderte Ressourcen sind während der kompletten Laufzeit garantiert
  - Möglichkeit Jobabhängigkeiten oder komplette Workflows zu definieren
- **Nachteil**
  - zunächst etwas ungewohntes Arbeiten

HPC-Systeme: Batchbetrieb

- Benutzer startet sein Programm nicht direkt in der Konsole
- schreibt eine kleine Batchskript-Datei
  - enthält Informationen über die angeforderten/benötigten Ressourcen
    - Core-Anzahl, Hauptspeicherbedarf, Rechenzeit, ….
  - enthält den eigentlichen Programmaufruf
- Batchskript-Datei wird vom Login-Knoten an den Batchserver übergeben
  - durchsucht alle Knoten nach freien Ressourcen
    - Job startet sofort oder wird in eine Warteschlange gestellt
- Batchsystemsoftware: SLURM

HPC-Systeme: Batchbetrieb



SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash   → Shell-Definition
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash   → Shell-Definition
#SBATCH --nodes=1   → Anzahl benötigter Rechenknoten
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1   → Anzahl MPI-Prozesse pro Rechenknoten
#SBATCH --cpus-per-task=1   → Anzahl Tasks pro Knoten (z.B. OpenMP Parallelisierung)
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00   → angeforderte Rechenzeit (Verweilzeit)
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb    → max. benötigter Hauptspeicher pro Knoten
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster   → Partition auf der Job laufen soll (hier x86 Linux cluster)
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#/!bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob    → Name des Batchjobs
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) serielle Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out   → Dateiname für Standardausgabe
#SBATCH --error=testjob.err   → Dateiname für Fehlerausgabe

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) parallele MPI Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=2 → Anforderung von 2 Rechenknoten
#SBATCH --tasks-per-node=32 → auf jedem Knoten werden 32 Cores benötigt
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4 intelmpi/20.04
# Programmstart
mpirun –np 64 ./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (NEC Linux Cluster) parallele OpenMP Berechnung


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1 → Anforderung von 1 Rechenknoten
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=16 → auf dem Knoten sollen 16 OpenMP Threads laufen
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung und Programmstart
module load intel/20.0.4
export OMP_NUM_THREADS=16
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (SX-Aurora TSUBASA)


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH –gres=ve:1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=vector
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

export VE_PROGINF=DETAIL
export OMP_NUM_THREADS=8
./vector.x
```

```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH –gres=ve:1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=vector
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

export VE_PROGINF=DETAIL
module load necmpi/2.11.0
source necmpivars.sh
mpirun -nn 1 -nnp 8 -ve 0-0 ./vector.x
```

SLURM-Batchskript (SX-Aurora TSUBASA)


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH –gres=ve:8
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=vector
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

export VE_PROGINF=DETAIL
module load necmpi/2.11.0
source necmpivars.sh
mpirun -nn 1 -nnp 64 -ve 0-7 ./vector.x
```

SLURM-Batchskript (GPU-Knoten)


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH –gpus-pernode=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=gpu
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

module load intel/19.0.4
time  ./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM-Batchskript (caucluster)


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=base  (--partition=highmem für Knoten mit 2 bzw. 4TB RAM)
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

module load intel2021-env/2021.6.0
time ./prog

# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM: Abgabe/Kontrolle von Batchjobs

- Kenntnis weniger Kommandos ausreichend
  - **sbatch *jobskript***
    - Abgabe einer Batchberechnung
  - **squeue**
    - Auflistung aller Jobs im System
  - **squeue –u *username* bzw. squeue --me**
    - Auflistungen der eigenen Jobs
  - **scancel *jobid***
    - Beenden eines laufenden bzw. entfernen eines wartenden Jobs
  - **scontrol show job *jobid***
    - liefert Details über einen bestimmten Job
  - **sinfo**
    - Zeigt Informationen über verfügbare Partitionen an

SLURM: weitere Kommandos

- max. Rechenzeit per Default: 48 Stunden
  - #SBATCH --qos=long → Rechenzeit bis 10 Tage möglich
  - Für längere Rechenzeiten extra Validierung erforderlich

- benötigte CPU-Art genauer spezifizieren
  - sinfo --Node -o "%20N %20c %20m %20f %20d"
  - z.B. NEC-Cluster: Skylake oder Cacade Lake CPU
  - #SBATCH --constraint=cascade

SLURM-Batchskript : jobinfo Kommando


```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --mem=10000mb
#SBATCH --partition=cluster
#SBATCH --job-name=testjob
#SBATCH --output=testjob.out
#SBATCH --error=testjob.err

#Laden der Softwareumgebung
module load intel/20.0.4
# Programmstart
./prog
# Ausgabe der verbrauchten Ressourcen (Rechenzeit, Hauptspeicher des Jobs)
jobinfo
```

SLURM: jobinfo-Ausgabe

- Requested resources:

  Timelimit = 10-00:00:00 (864000s)

  MinMemoryNode = 180000M
  (180000.000M)

  NumNodes = 1

  NumCPUs = 32

  NumTasks = 1

  CPUs/Task = 32

- Used resources:

  RunTime = 1-01:29:57 (91797s)

  MaxRSS = 31857880K (31111.211M)

==========

- Important conclusions and remarks:

  * !!! Please, always check if the number of requested cores and nodes matches the need of your program/code !!!

  * !!! Less than 20% of requested walltime used !!! Please, adapt your batch script.

  * !!! Less than 20% of requested main memory used !!! Please, adapt your batch script.

Interaktive Batchjobs

- Möglichkeit interaktiv auf Batchknoten zu arbeiten
- caucluster:

  srun --pty –nodes=1 –cpus-per_task=1 –time=1:00:00 partition=base /bin/bash

- NEC HPC-System

  srun --pty --nodes=1 --cpus-per-task=1 --mem=1000mb --time=00:10:00 --partition=cluster /bin/bash

  srun --pty --nodes=1 --cpus-per-task=1 --mem=1000mb --time=00:10:00 --gres=ve:1 –partition=vector /bin/bash

Arbeiten mit dem Batchsystem

- nicht mehr Knoten und Cores anfordern als benötigt werden
- benötigte Rechenzeit und Hauptspeicher möglichst genau angeben
  - höherer Durchsatz und kürzere Wartezeiten
- Zwischenergebnisse abspeichern (insbes. bei sehr langen Laufzeiten)
- Standardausgabedatei möglichst klein halten
  - Ausgaben evtl. direkt in WORK-Verzeichnis umleiten

Dokumentation und Kontakt

- WWW-pages:
  - HPC-Angebote:
    - https://www.hiperf.rz.uni-kiel.de
  - NEC HPC-System:
    - https://www.rz.uni-kiel.de/de/angebote/hiperf/nesh
  - caucluster:
    - http://www.hiperf.rz.uni-kiel.de/caucluster/
  - Vortragsfolien:
    - https://www.rz.uni-kiel.de/de/angebote/hiperf/hpc-kurse

- **Mailingliste/Ticketsystem**
  - hpcsupport@rz.uni-kiel.de