

# HeFDI Data Talk

Datum	Thema	Referent*in(nen)
07. Oktober 2022	Hochleistungsrechnen (HPC) – für wen und wie eignet sich HPC in der Forschung?	Thorsten Reimann/Christian Iwainsky (Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen [HKHLR])



## Abstract:

Hochleistungsrechnen (HPC) ist in vielen Bereichen der Forschung längst als Methode etabliert. Doch immer noch erweitert sich - nicht zuletzt dank Big Data und Künstlicher Intelligenz - der Kreis der Einsatzgebiete. Zudem werden Forschende im Studium selten an diese wichtige Forschungsmethode herangeführt. Thorsten Reimann und Christian Iwainsky vom HKHLR zeigen gängige HPC-Anwendungen und Techniken, erläutern das HPC-Ökosystem in Hessen und beschreiben die Serviceangebote für die Nutzenden in Hessischen Hochschulen. Der Talk soll allen Interessierten einen Einblick in die Möglichkeiten, die HPC für die eigene Forschung hat, bieten.

## Zu den HeFDI Data Talks:

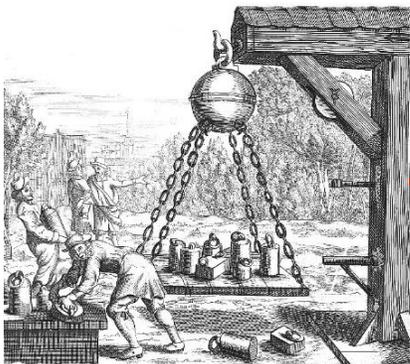
Die HeFDI Data Talks sind eine zweiwöchentliche offene Informations- und Diskussionsveranstaltung rund um das Thema Datenmanagement im Wissenschaftskontext, in deren Rahmen sich einschlägige NFDI-Konsortien sowie Forschungsdatenmanagements-Dienste vorstellen. Die Reihe diskutiert aktuelle Themen und stellt zahlreiche – auch lokale und regionale – Tools und Services vor. Angeboten werden die HeFDI Data Talks von der Landesinitiative HeFDI - Hessische Forschungsdateninfrastrukturen, welche vom Hessischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst (HMWK) finanziert wird.

DOI-Link: <https://doi.org/10.5281/zenodo.7257905>; Lizenzinformation: Creative Commons Attribution 4.0 International ([CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/))



# Hochleistungsrechnen (HPC) - für wen und wie eignet sich HPC in der Forschung?

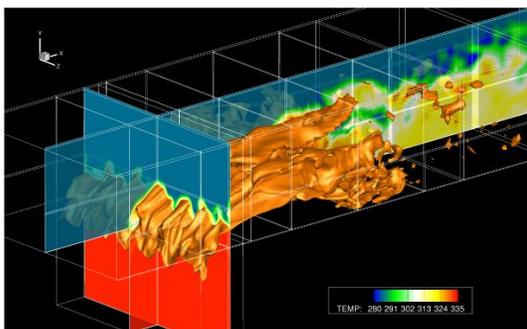
# Paradigmen der Wissenschaft



Experiment

Theorie

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho^{\text{inc}} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + u_i^{\text{inc}} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} &= 0 \\ \rho^{\text{inc}} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho^{\text{inc}} u_j^{\text{inc}} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + c^2 \rho^{\text{inc}} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + c^2 u_i^{\text{inc}} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} &= \frac{\partial p^{\text{inc}}}{\partial t} \end{aligned}$$



Simulation

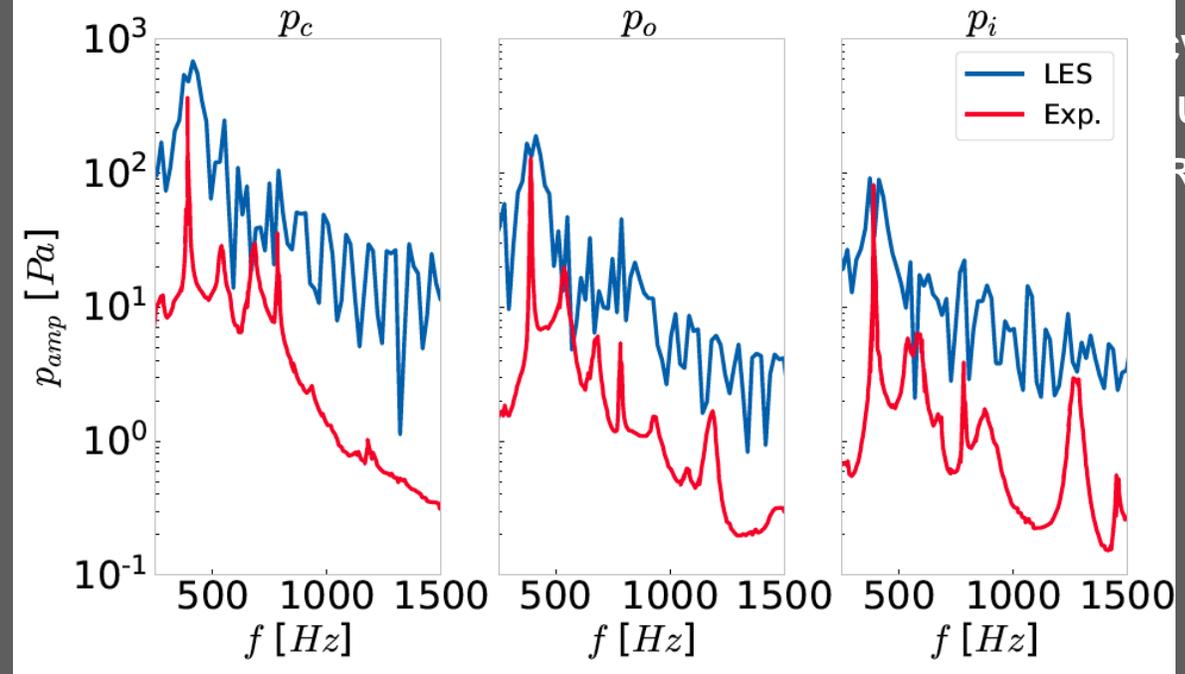
Datengetrieben

```
rank() == 0:
backs.append(keras.ca
= input_data.MyDataG
del.fit_generator(ger
cal
```

# Anwendungsbeispiel 1: Large Eddy Simulation der Brennkammer einer Gasturbine



Study on thermoacoustic  
oscillations



- ▶ Gute Übereinstimmung der dominanten akustischen Moden
- ▶ Identifikation eines thermo-akustischen Feedback-Mechanismus

# Anwendungsbeispiel 2: Direct Numerical Simulation von Wasserstoffverbrennung

- H<sub>2</sub>-betriebene Systeme: Gefahr von Flashback, wenn das System mit zu viel Brennstoff oder zu geringer Geschwindigkeit betrieben wird.
- Flashback ist katastrophal für den Motorbetrieb,
- aber die zugrundeliegenden Mechanismen sind selbst in einfachen Konfigurationen noch unverstanden.

## Flame flashback and its damage on burner



## DNS of H<sub>2</sub>/air flame flashback in a cylindrical swirl bluff-body burner

1.26 billion grid points using 20K cores

$$L_x = 160 \text{ mm}, N_x = 3500$$

$$L_r = 40 \text{ mm}, N_r = 1000$$

$$L_\theta = 2\pi, N_\theta = 360$$

■ H<sub>2</sub>/air equivalence ratio: 0.8

■ Axial inflow velocity: 5 m/s

■ Inflow swirl number: 1.0

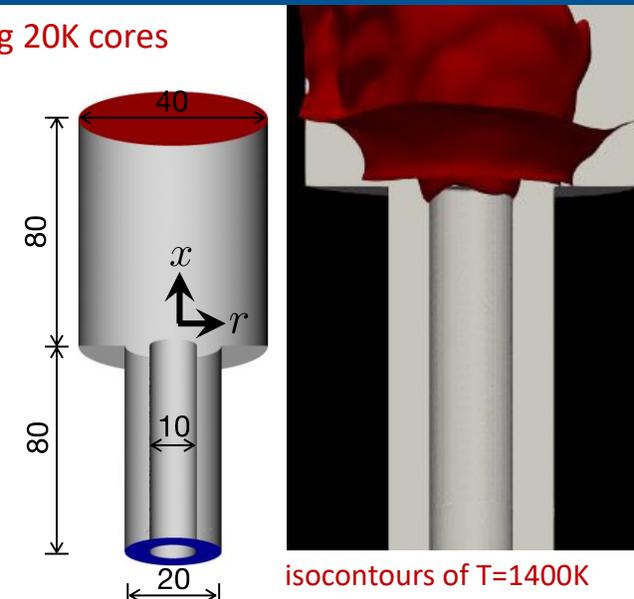
■ Inflow temperature: 298 K

■ Pressure: 1.0 atm

■ Reynolds number: 4800

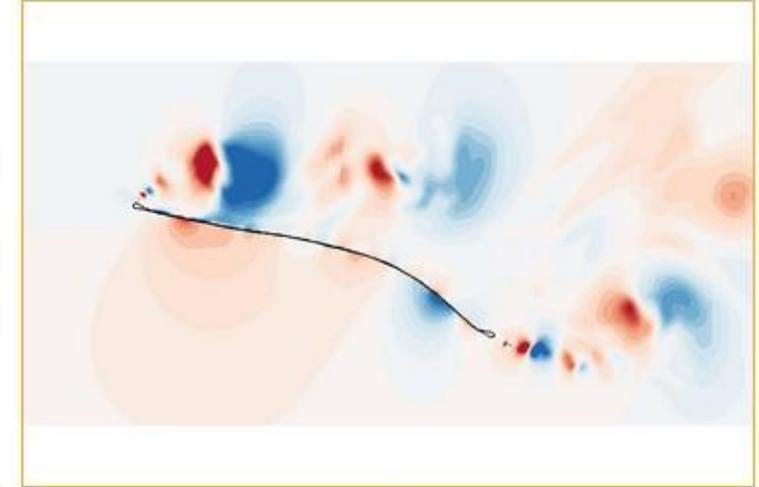
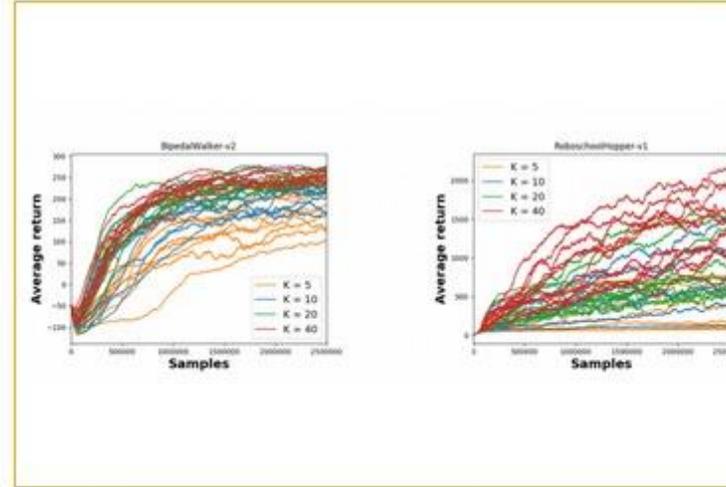
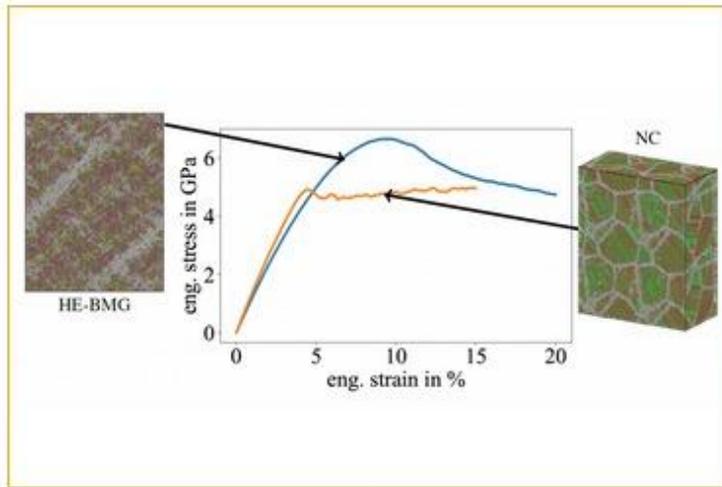
■ H<sub>2</sub>/air: 9 species/19 reactions

1 ms flashback costs 1M core-h



# H<sub>2</sub>

# HPC-Anwendungsbeispiele an der TU Darmstadt



## Reinforcement of Cr-Mn-Fe-Co-Ni High Entropy Bulk Metallic Glasses: A Molecular Dynamics Study

We investigate the CrMnFeCoNi (Cantor alloy)[1] high-entropy bulk metallic glass (HE-BMG). HE-BMGs are a new amorphous ...

Engineering Sciences

Materials Science

## Interpretable Reinforcement Learning

Deep Reinforcement Learning can solve difficult high dimensional tasks, by exploiting the expressive representation ...

Engineering Sciences

Computer Science

## Simulation of Aeroacoustic Effects Induced by Fluid-Structure Interaction

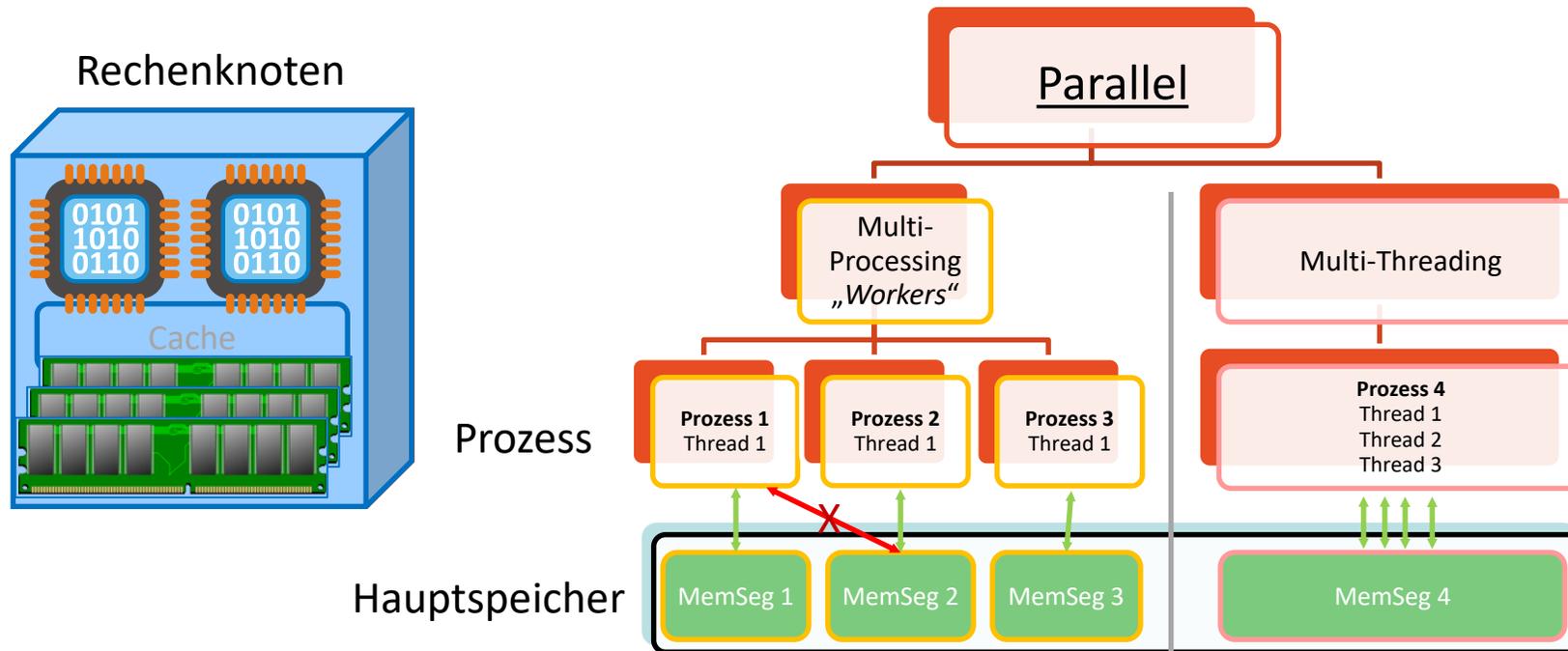
Aerodynamic sound contributes significantly to the noise emission of high-speed applications such as trains, aircraft ...

Engineering Sciences

Heat Energy Technology, Thermal Machines, Fluid Mechanics

Auszug aus der Projektdatenbank des HKHLR mit HPC-Projekten der TU Darmstadt auf Lichtenberg, <https://www.hkhlr.de/en/projects>.

# Seriell vs. Parallel, Prozess vs. Thread



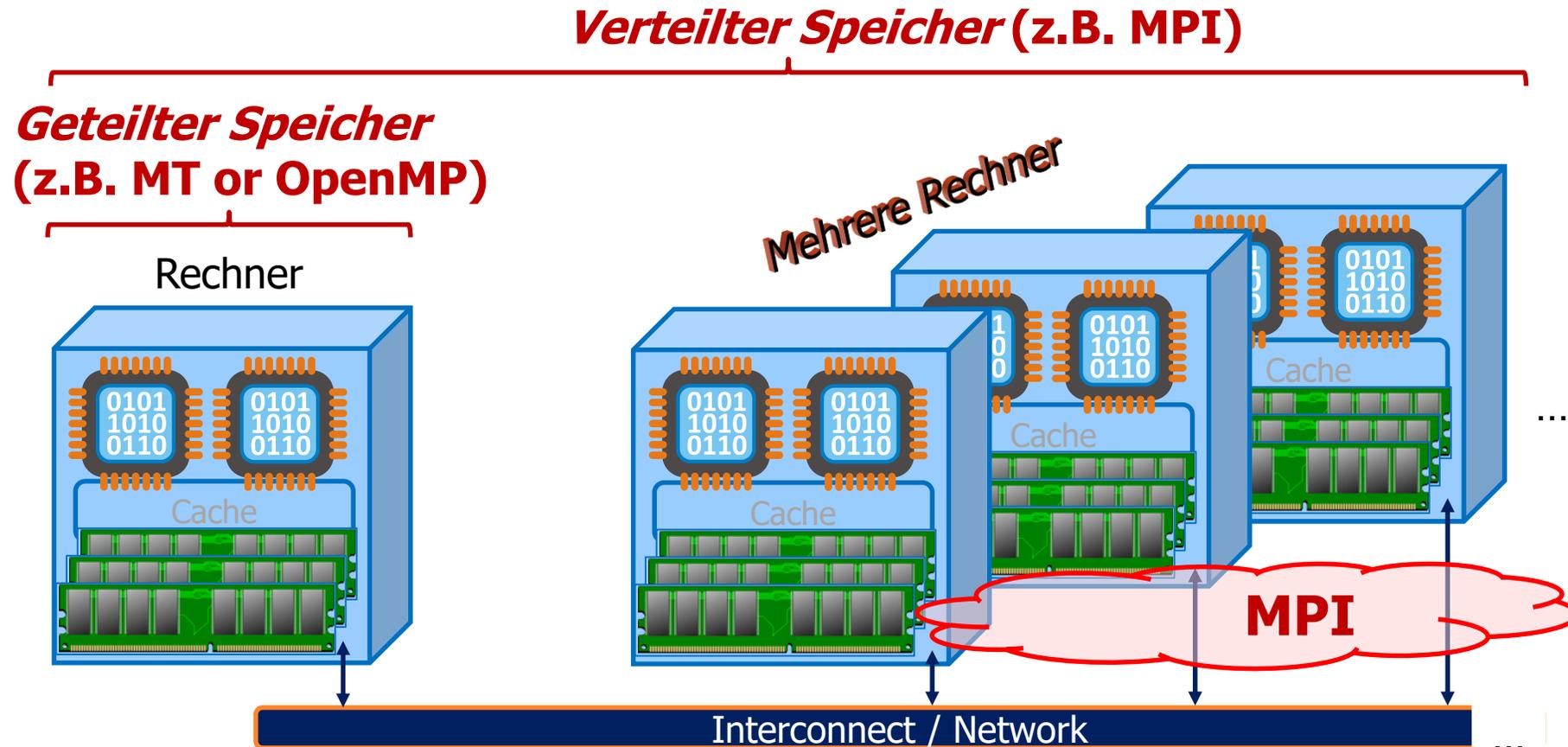
## Bausteine:

- Ein **serielles Programm (Prozess)** kann mehrfach ausgeführt werden ohne sich gegenseitig zu beeinflussen.
- Ein **Thread** ist eine „**Sequenz**“ von CPU Befehlen. Ein Prozess besteht aus mindestens einem Thread
- Speicher von Prozessen sind isoliert.

## Parallelität:

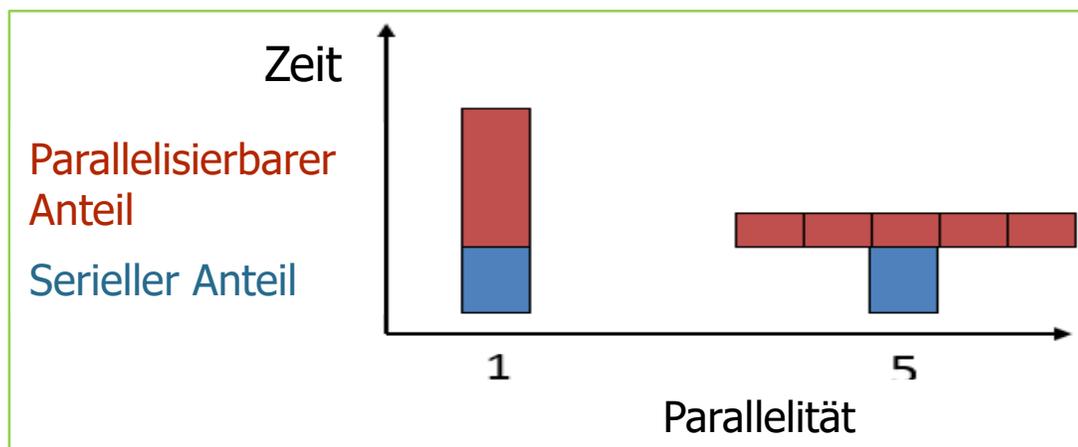
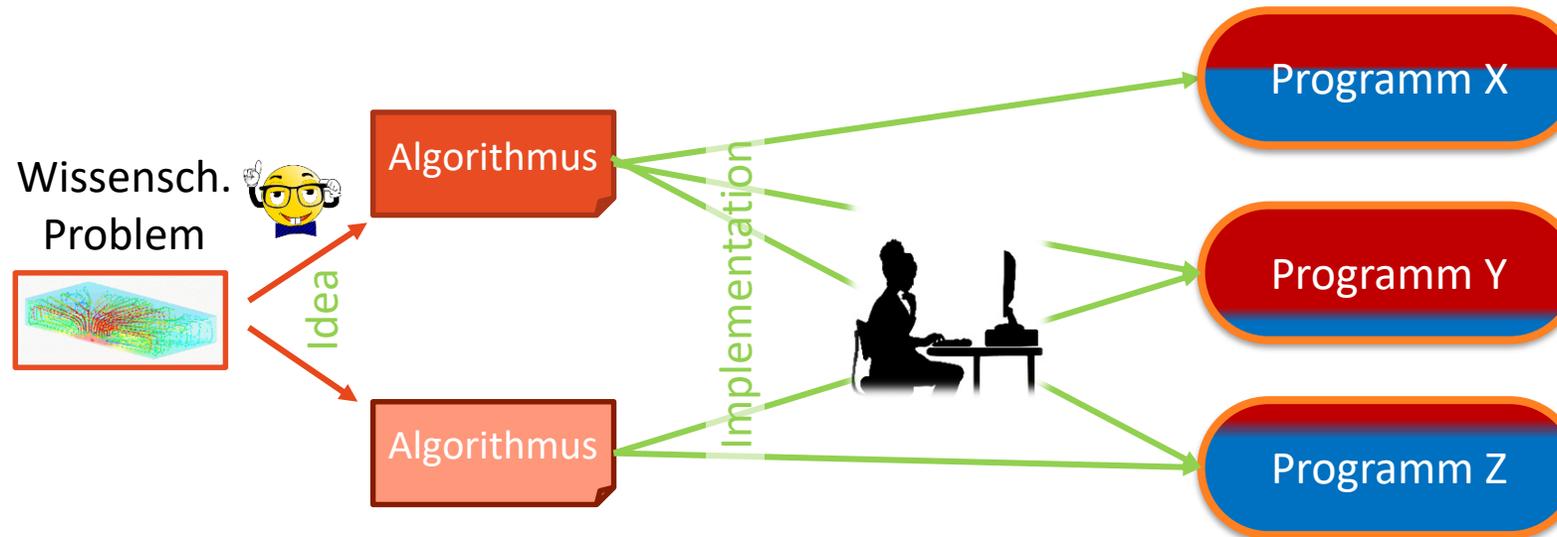
- **Parallelität #1: Mehrere Instanzen** eines Programm bearbeiten **je einen Datensatz**.
- **Parallelität #2: Mehrere Instanzen** eines Programms bearbeiten einen **einzigem Datensatz**
- **Parallelität #3: Eine Instanz** eines Programms bearbeitet **einen Datensatz** mit **mehreren Threads**

# Datenaustausch: Geteilter Speicher und verteilter Speicher



- MT = Multi-Threading (typischerweise auf einen Rechner beschränkt)
- OpenMP = Open Multi Processing
- MPI = Message Passing Interface (überall, solange Datenaustausch möglich)

# Skalierbarkeit ... (Effizienz)



**AMDAHL'S Gesetz:** Ein Programm kann nicht schneller als die **Summe** der **seriellen Anteile** werden.\*

*\*Typischerweise, es kommt drauf an.*

# Skalierbarkeit – mehr ist immer Besser?

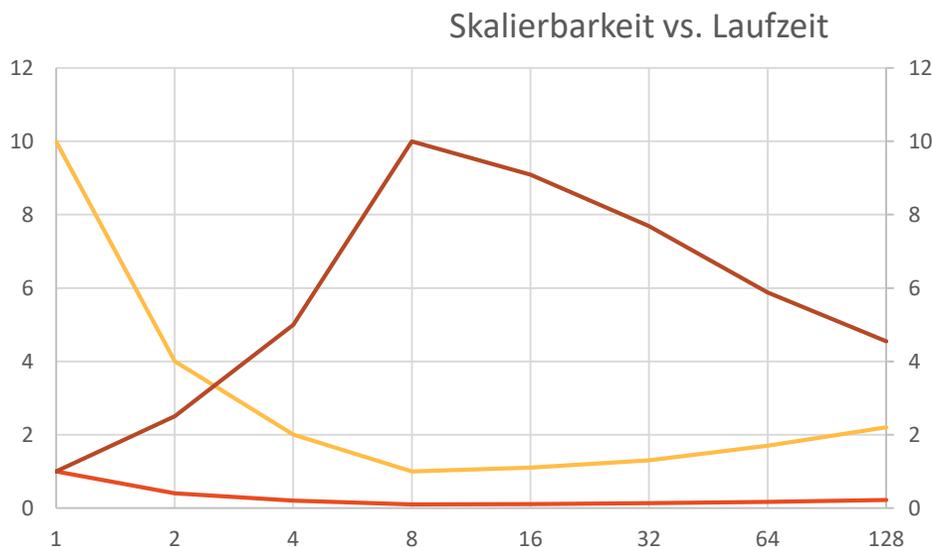
## Starke Skalierbarkeit (strong scalability):

Zeitreduktion durch mehr Parallelität bei gleichbleibender Problemgröße.

## Schwache Skalierbarkeit (weak scalability):

Fähigkeit größere Probleme durch den Einsatz von proportional mehr Parallelität zu lösen.

$$\text{Skalierbarkeit} = \frac{\text{Laufzeit}_N (\text{Parallelität}_N)}{\text{Laufzeit}_{Ref.} (\text{Parallelität}_{Ref.})}; \quad N > Ref.$$

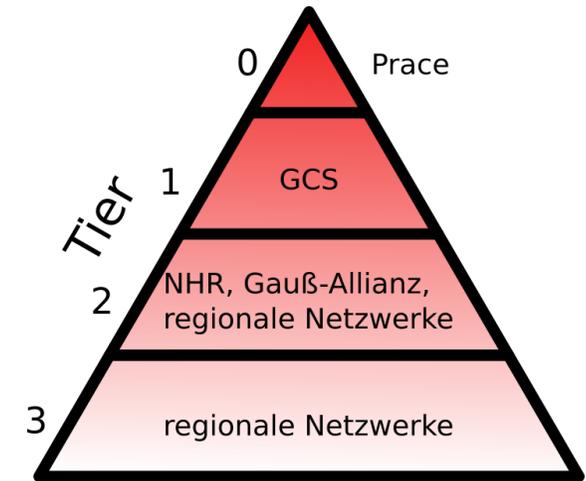


Laufzeit	10,00	4,00	2,00	1,00	1,10	1,30	1,70	2,20
Parallelität	1,00	2,00	4,00	8,00	16,00	32,00	64,00	128,00

— Skalierbarkeit  
— Laufzeit  
— Arbeit / Zeit

# Wissenschaftliches HPC-Ökosystem in Deutschland

- Tier-1: Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, Jülich Supercomputing Centre, Leibniz Supercomputing Centre } ca. 19-45 PFLOP/s  
Zusammenschluss als Gauss Centre for Supercomputing
  - Finanzierung 90% Bund
- Tier-2: HPC-Cluster von Universitäten und Forschungseinrichtungen (bis ca. 8 PFLOP/s)
- Tier-3: kleinere universitäre Cluster, i.d.R. Finanzierung aus Forschungsdrittmitteln
- Tier-0: Zusammenschluss der Tier-1-Zentren auf EU-Ebene



# Bestandteile des HPC-Ökosystems\*



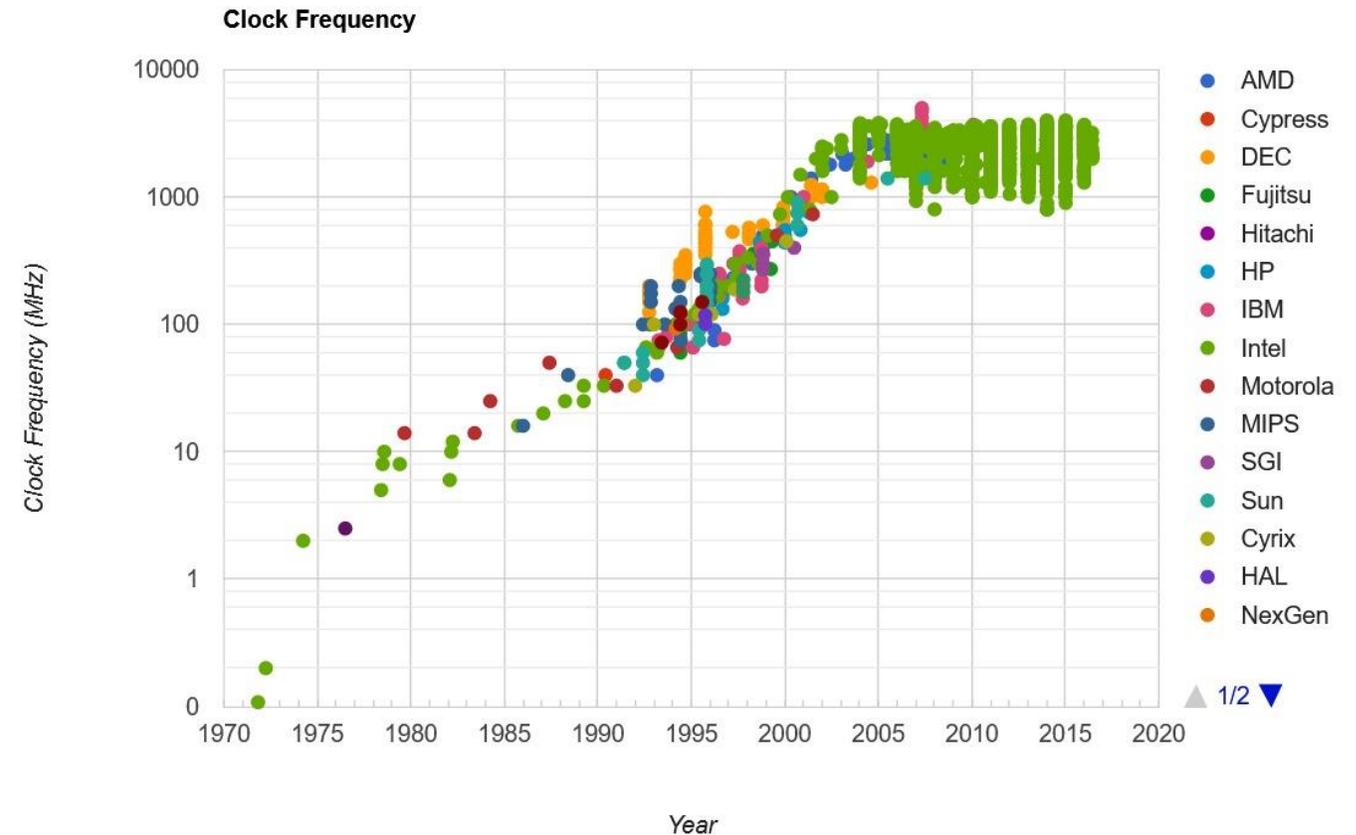
- **Hardware:** Hochleistungsrechner, Hochgeschwindigkeits-Netzwerke, parallele und leistungsfähige Dateisysteme sowie Systeme für die Langzeitarchivierung.
- **Software** - parallele und effiziente Simulation und Analyse komplexer Modelle
- **Rechenzentren** - Infrastrukturen für die Energieversorgung, für die Kühlung, für die Administration und die Rechnerräume sowie Sicherheitskonzepte.
- **Administratoren und HPC-Experten** - Nur mit speziell geschulten Administratoren und HPC-Experten ist eine effiziente Nutzung von HPC-Ressourcen überhaupt möglich.
- **HPC als Wissenschaft** - Innovative Methoden zur Unterstützung der verschiedenen Anwendungsgebiete und -wissenschaften.
- **HPC-Nutzer** in der Wissenschaft sind die zentralen Akteure und das Bindeglied zwischen Hardware und Software.

(\*nach <https://gauss-allianz.de/>)

# HPC - Leistungsentwicklung



<https://www.top500.org/statistics/perfdevel/>



[http://cpudb.stanford.edu/visualize/clock\\_frequency](http://cpudb.stanford.edu/visualize/clock_frequency)

# Der Lichtenberg II – Hochleistungsrechner der TU Darmstadt



- Inbetriebnahme 2020
- TOP500 Juni 2020/Juni2021: #92 / #131
- Green500 Juni 2020/Juni2021: #44 / #67
- Effizienter Betrieb durch Nachnutzung der Abwärme in der Heizperiode (Deutscher Rechenzentrumspreis 2017)
- Wissenschaftliche Projektbewirtschaftung
- Zugänglich für alle nationale Wissenschaftler nach Antrag

CPU-Knoten	630 MPI / 2 MEM (Intel Xeon Platinum 9242)
GPU-Knoten	8 * V100 / 3 * A100 (Nvidia)
Speicher/Knoten	384 GB / 1536 GB (MEM)
Anzahl Cores	62.592
Gesamtspeicher	257 TByte
CPU Peak	ca. 4.5 PFLOPS
GPU Peak	424 TFLOPS
Dateisystem	IBM Spectrum Scale
Storage	4 PByte
Storage Bandbreite	120 GByte/s (Lesen) / 106 GByte/s (Schreiben)
Betriebssystem	CentOS
Scheduler	SLURM

# MaRC3a – Hochleistungsrechner der Universität Marburg



- In Betrieb seit April 2022
- Direkter Zugriff auf das Marburger Storage Cluster (MaSC)
- Beschafft durch die Fachbereiche Physik, Pharmazie, Biologie, Mathematik & Informatik

CPU-Knoten	50x AMD EPYC 7702P
GPU-Knoten	12x V100S / 16x A100 40GB / 37x A100 80GB 6x A40 (Nvidia)
Speicher/Knoten	256 GB / 1024 GB (MEM)
Anzahl Cores	3.200
Gesamtspeicher	257 TByte
CPU Peak	ca. 53 TFLOPS
GP	620 TFLOPS
Storage	1.3 PByte
Betriebssystem	CentOS
Scheduler	SLURM

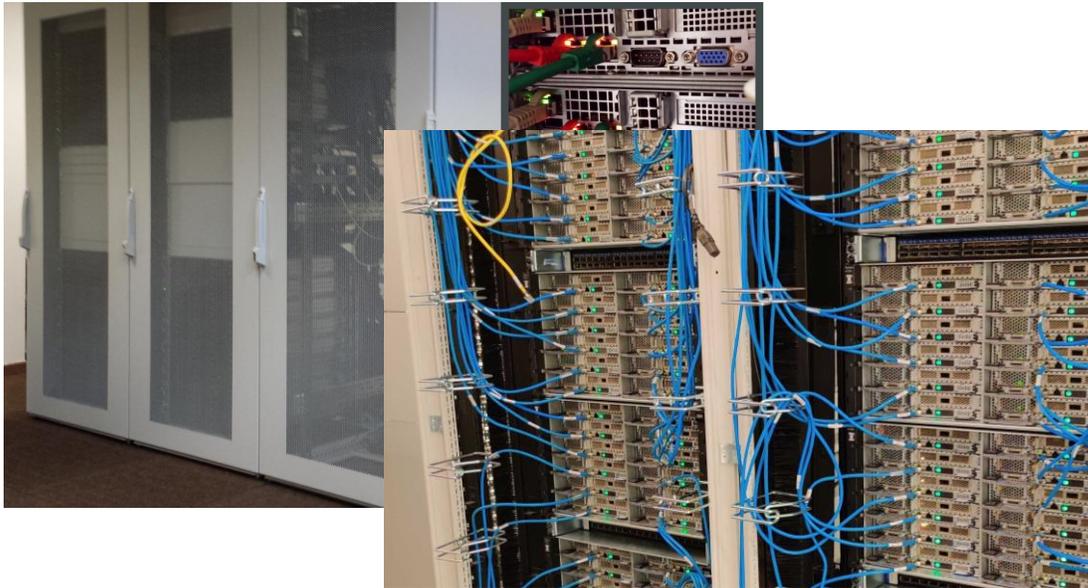
# JustHPC – Justus-Liebig-Universität Gießen



- Inbetriebnahme 2020
- System geteilt in öffentlichen Bereich und DFG Projektbereich

CPU-Knoten	40x Intel Xeon Gold 6126 212x Intel Xeon 6226 4x Intel Xeon 6226
Speicher/Knoten	192 GB 192 GB 1536 GB
Anzahl Cores	6.240
Gesamtspeicher	~ 55 TByte Netzwerkdateisystem / 321 TByte Temporäres Dateisystem
CPU Peak	ca. 373 TFLOPS
Dateisystem	BeeGFS
Storage	376 TByte
Betriebssystem	CentOS 7
Scheduler	SLURM

# HPC System – Universität Kassel



- Heterogenes Cluster, Unterschiedliche CPU Sub-Typen
- 53 Knoten offen für alle Uni-Mitarbeiter
- Moderierte Sektion

CPU-Knoten	101x AMD Opteron 62xx 19x AMD Opteron 63xx 162x Intel Xeon E5 3x Intel Xeon Gold
Speicher/Knoten	32 GB - 512 GB 128 GB / 255 GB
Anzahl Cores	7264
Gesamtspeicher	34256
Dateisystem	GPFS
Storage	12 TByte Netzwerk-Dateisystem / 2-8 TByte Lokaler Speicher
Betriebssystem	CentOS 7
Scheduler	SLURM

# Schulung und Beratung von HPC-Nutzern

## Ressourcenverschwendung durch...

- ...schlecht performende Codes,
- ...falsche Benutzung gut performender Codes

## Führt zu ...

- ...schlechterer Clusternutzung
- ...weniger Forschungsergebnissen

## Benutzer-Typen

- Black-Box-Benutzer
- Quellcode-Augmentor
- Quellcode-Entwickler

## Benutzer...

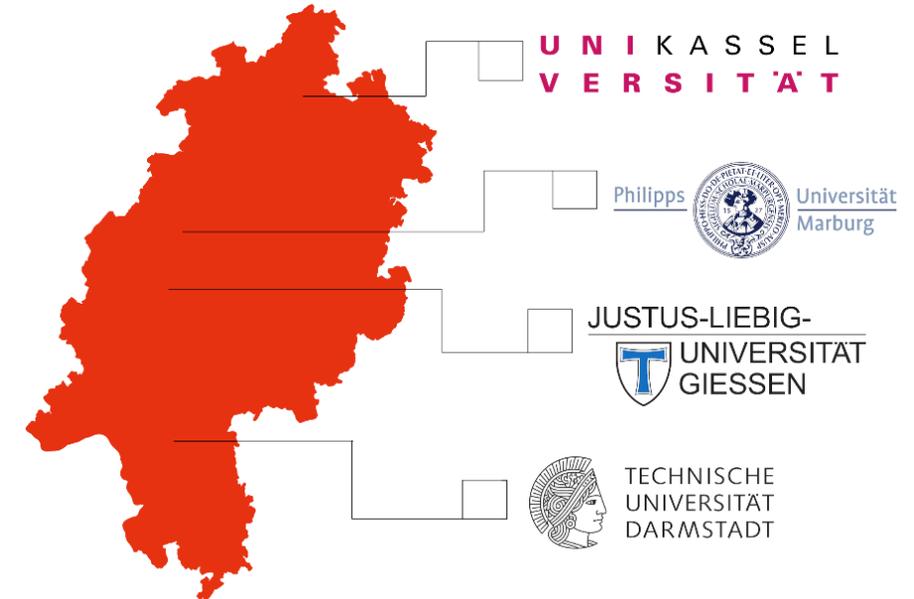
- ...haben keine tiefe Programmiererfahrung
- ...stehen unter Zeitdruck
- ...wechseln alle 3-5 Jahre

## Code-Verbesserungen sind

- ...zeitraubend
- ...kein Forschungsziel

# Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen (HKHLR)

- Seit 2014
- Experten an jedem Standort, durch Vernetzung ist die Nutzung komplementären Kompetenzen möglich
- Standardmaterial an jedem Standort
- **Training:** mehrstufiges Schulungsprogramm für Anfänger und Fortgeschrittene
- **Consulting:** HPC-spezifischer Support und Projekte zum Performance Engineering u.ä.
- **Monitoring:** Überwachung der effizienten Nutzung von Rechenressourcen
- **Information:** umfangreiche Webseite inkl. Datenbank hessischer HPC-Projekte



# HKHLR Trainingsangebote

	Wann	Was
<b>Cluster intro</b>	Monatlich	Nutzung eines HPC-Clusters
<b>ProTHPC</b> – Proficiency training in HPC	2-3/Jahr	Grundlegende HPC-Kenntnisse: Linux, Scheduler, Kompilieren, Versionsverwaltung, Debugging
<b>HiPerCH</b> – High Performance Computing in Hessen	1/Jahr	Fortgeschrittene und entwicklerspezifische HP-Themen, z.B. Paralleles Programmieren, Research Software Engineering, ...
Einzelkurse	nach Bedarf	Introduction to Deep Learning, R on HPC Systems, Python...

# Informationen zu HPC in Hessen

- [www.hkhlr.de](https://www.hkhlr.de)
  - Informationen und Materialien
  - Trainingsprogramm
  - Projektdatenbank
  - Forschungsfilme
- HPC Hessen Newsletter
  - HPC Hessen News
  - Trainingsankündigungen (Hessen und national)
  - Abonnierbar über <https://www.hkhlr.de/de/kontakt>

https://www.hkhlr.de/de

Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen

SERVICE EVENTS FORSCHUNG ÜBER UNS KONTAKT EN

**Brainware for Science**

Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen (HKHLR)

Primäres Ziel des HKHLR ist die **beratende Unterstützung** der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler hinsichtlich aller Fragen der effizienten und nachhaltigen Nutzung moderner Hochleistungsrechner.

Cluster

Über Uns

Material

Events

# Nationales Hochleistungsrechnen (NHR) in a Nutshell

- Ziele:
  - HPC-Ressourcen für wissenschaftliche Forschung an allen deutschen Universitäten (Tier 2)
  - Koordinationsstruktur für interdisziplinäre standortübergreifende Kooperation
  - Herausbildung von Synergieeffekten durch Entwicklung standortspezifischer Profile
  - Entwicklung der HPC-Kompetenzen der Nutzer und junger Wissenschaftler\*innen
  - Stärkung des Wissenschaftlichen Rechnens
- Förderung von neun themenspezifischen NHR-Zentren über zehn Jahre
- Koordination über gemeinsame Geschäftsstelle
- Zusammenarbeit der Zentren in gemeinsamen Projekten, z.b. HPC-Container, Performance-Monitoring, zentrales IDM, Performance Lab, ...
- NHR4CES@TUDa: [www.nhr4ces.de](http://www.nhr4ces.de)
- NHR-Verein: [www.nhr-verein.de](http://www.nhr-verein.de)

