



UNIVERSITÄT  
LEIPZIG

ZKI Arbeitskreis Supercomputing, Herbsttagung 2022

# **Scientific Computing an der Universität Leipzig**

Dr. Stefan Kühne

Forschung und Entwicklung, Universitätsrechenzentrum

# UNIVERSITÄT LEIPZIG

- 1409 gegründet
- Motto: „Aus Tradition Grenzen überschreiten“
- Gestaltung wissenschaftlich, sozial, ökonomisch und kulturell wirksamer Ideen und Lösungen



- 30.000 Studierende, 5.500 Beschäftigte
- 14 Fakultäten bieten 150 Studiengänge, u.a. in
  - Naturwissenschaften (Physik, Chemie, ...)
  - Medizin, Veterinärmedizin
  - Geistes- und Sozialwissenschaften
  - Wirtschaftswissenschaften
- Interdisziplinäre Einrichtungen
  - iDiv – Deutsche Zentrum für integrative Biodiversitätsforschung Halle-Jena-Leipzig
  - ReCentGlobe – Research Centre Global Dynamics

## 1962 GRÜNDUNG RECHENZENTRUM



Zeiss-Rechen-Automat 1

### Aufgaben

- Ausbildung zum maschinellen Rechnen
- Übernahme von Aufgaben zur Lösung von Forschungsvorhaben
- Ausbildung von Programmierern
- Übernahme von Aufgaben für die Wirtschaft

## DIE HISTORIE KÜNSTLERISCH AUFBEREITET



**QUANTEN  
SPRÜNGE**  
Von Leibniz zu Qubits

Galerie im Neuen Augusteum  
Augustusplatz 10, 04109 Leipzig

20. Oktober bis 20. Dezember 2022  
und 4. bis 28. Januar 2023

AUSSTELLUNG ZUM 60. JUBILÄUM DES UNIVERSITÄTSRECHENZENTRUMS

# 2014 GRÜNDUNG ABT. FORSCHUNG UND ENTWICKLUNG

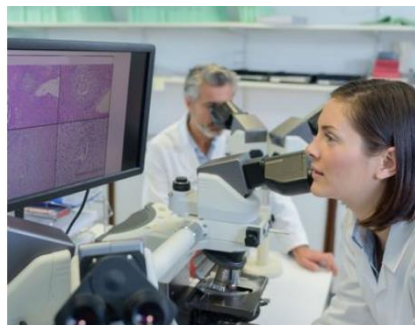
## ANGEWANDTE FORSCHUNG



### Digitalisierung Arbeits- und Lebenswelten

Kernthemen sind die Analyse und Gestaltung von digitalen Transformationsprozessen innerhalb der Arbeits- und Lebenswelt.

**MEHR ERFAHREN >**



### Digitalisierung Forschungswelten

In diesem Forschungsbereich zielen wir auf Methoden und Techniken im Umfeld des wissenschaftlichen Rechnens ab.

**MEHR ERFAHREN >**



### Digitalisierung Sammlungswelten

Kernthemen sind die Digitalisierung, Aufbereitung und Verknüpfung von Daten und Metadaten aus analogen Sammlungen.

**MEHR ERFAHREN >**

# FORSCHUNG UND ENTWICKLUNG AM URZ

## FORSCHUNGSUNTERSTÜTZUNG

- **(Wegbereiter der) Digitalisierung der Forschung, z.B.**
  - Forschungsinformationssystem
  - Drittmittelverwaltung
  - Kollaborationssysteme
- **Forschungsdatenmanagement**
  - Beratung, Schulung
  - Etablierung föderiertes Forschungsdatenmanagement an der UL
  - Integration in bestehende Leistungsangebote der beteiligten Einrichtungen
- **Wissenschaftliches Rechnen (Scientific Computing)**

# SCIENTIFIC COMPUTING @ LEIPZIG UNIVERSITY

CORE FACILITY MIT ZENTRALEM ANGEBOT FÜR

- Beschaffung und Betrieb synergetisch genutzter Hardware-Ressourcen
- Entwicklung und Betrieb von IT-Services für wissenschaftliches Rechnen (z.B. HPC, Data Science mit Jupyter und R-Studio)
- Informations-, Beratungs- und Schulungsangebote
- Vernetzung innerhalb der Universität Leipzig
- Integration dezentraler Gruppen
- Vernetzung mit regionalen Partnern



Wissenschaftler:innen UL



SC@UL



Hoch/Höchstleistungsrechnen

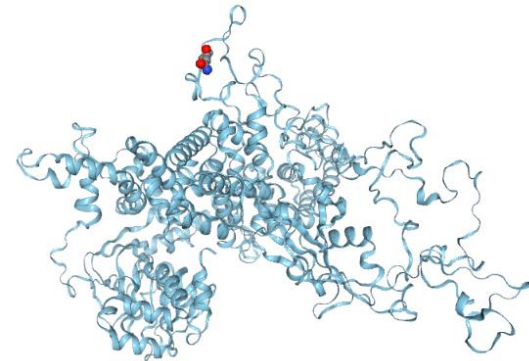
## HIGH-PERFORMANCE COMPUTING

- Deployment/Konfiguration: Foreman, Ansible
- Operating System: Rocky Linux 8
- Ressourcen- und Workload-Management: slurm (max. job time: 2–42 days)
- Paralleles Filesystem: Lustre, CEPH, NFS
- Software Tree: EasyBuild
- Monitoring: checkMK (Hardware), Grafana (Slurm)
- Virtualisierung: Proxmox
- Threat Detection: OpenVas
- ...

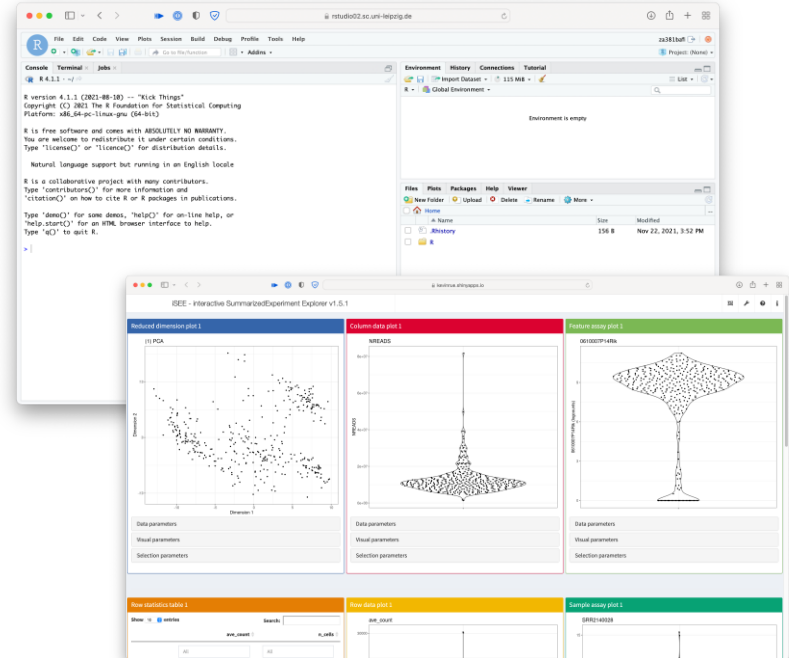
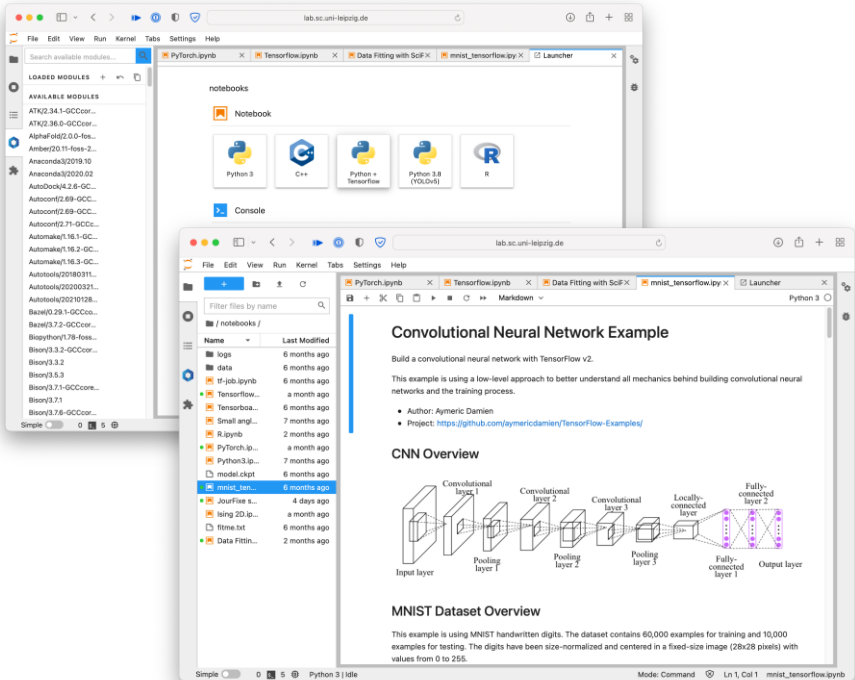


## SOFTWARE TREE

- über 400 Software-Pakete und -Bibliotheken
- <https://www.sc.uni-leipzig.de/software/home.html>
- u.a.
  - bio: AlphaFold, GROMACS, RoseTTAFold, Rosetta
  - chem: Amber, Gaussian, ORCA
  - math: MATLAB, scipy



# WEB-BASIERTE ZUGÄNGE (JUPYTER, R-STUDIO)



# DOKUMENTATION

- Zugänge
- Tutorials
- Beispielskripte
- FAQs
- Hardware/Software-Überblick
- Blog
  - Neuigkeiten
  - Ankündigungen

**Batch scheduler - Slurm**

**What is a batch system?**

A batch system is used to distribute jobs of different users to one or more cluster system. The SC systems use `slurm` as a batch system. Different computing resources are defined and organized into partitions/queues

**What queues are available?**

The availability of partitions/queues for your jobs depends on the assigned permissions. To check what partitions are available: On `login[01-03].sc.uni-leipzig.de`

```

[cy264popy@login01 ~]$ sinfo -s
PARTITION  AVAIL  TIMELIMIT  NODES(A/L/O/P)  MODELST
sirius     up  2:00:00:00  0/1/0/1  sirius01
polaris   up  2:00:00:00  0/100/0/0  polaris[01-10]
polaris-long up  4:00:00:00  0/4/0/4  polaris[07-10]
clara     up  2:00:00:00  2/22/0/20  clara[02,04-31]
clara-long up  10:00:00:00  7/4/0/6  clara[02,04,20-31]
clara-prio up  10:00:00:00  2/22/0/20  clara[02,04-31]
paula     up  2:00:00:00  0/12/0/12  paula[01-12]
  
```

In this example `paula` is the default queue and there are six other queues available to use. Queues with the "-long" suffix contain fewer nodes but allow for longer time limits.

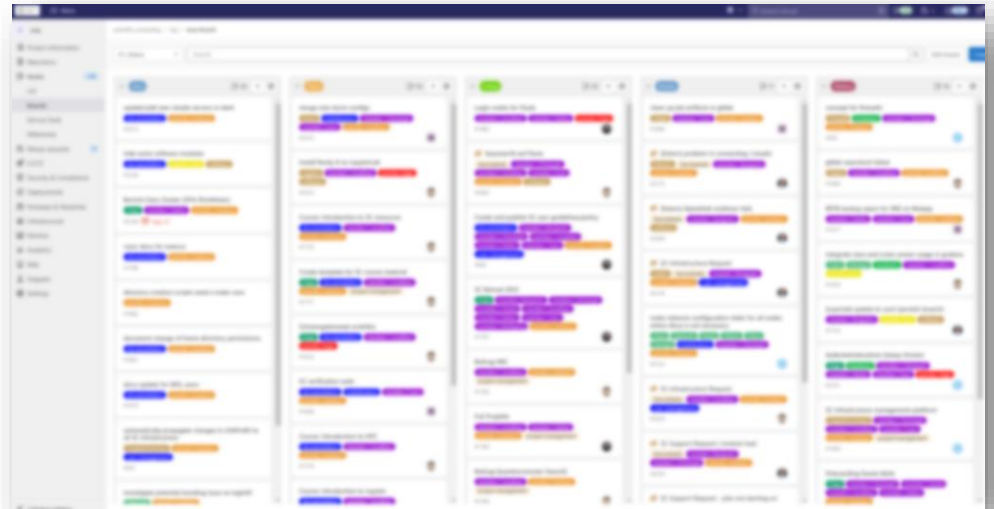
**How to run a (parallel) program?**

There are two ways to run a program on the cluster: Interactive and batch. The interactive mode is only recommended for testing. The normal way is to submit a batch job.

<https://www.sc.uni-leipzig.de/user-doc/>

## DAS TEAM SCIENTIFIC COMPUTING

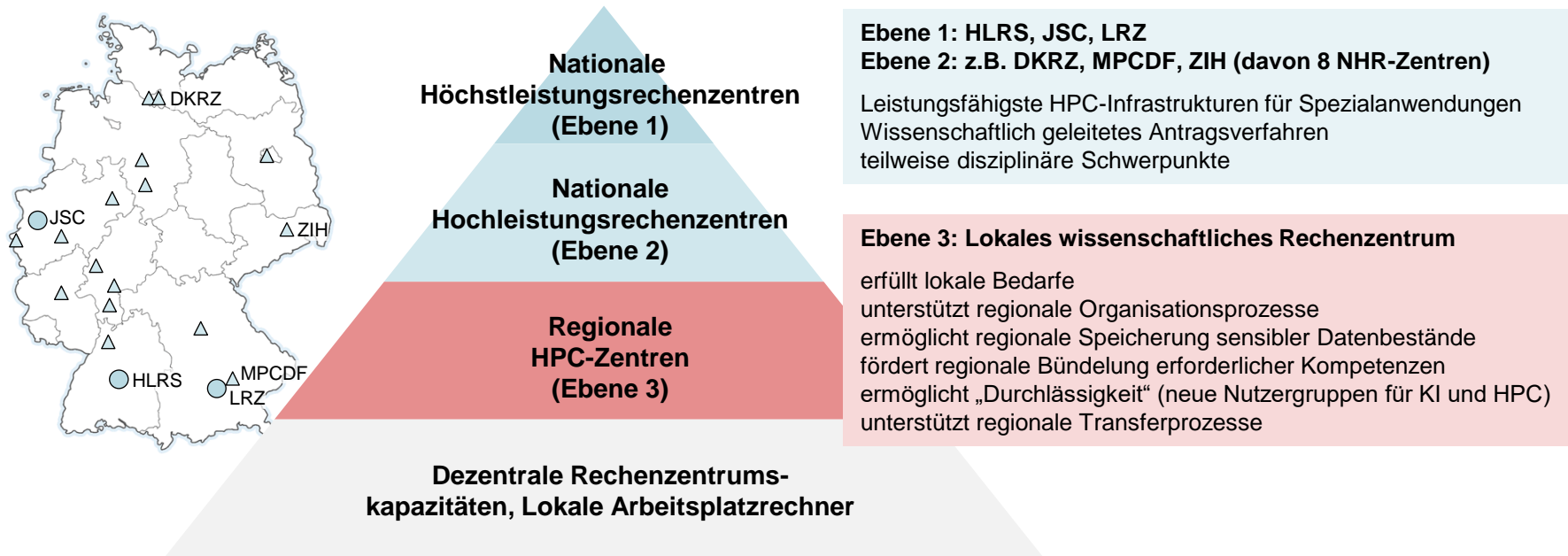
- 4 VZÄ  
+ derzeit 3 DM-  
finanzierte Stellen
- agiles Vorgehen
  - Stand-ups
  - Sprint-Meeting
  - Meilensteine
- Nutzeranfragen über  
Servicedesk
- strategische Abstimmungen  
über HPC Advisory Board



## COMPUTE-RESSOURCEN (SEIT 2019)

- **2022 – 32 CPU-Knoten**
  - CPU: 2x AMD(R) EPYC(R) 7713 @ 2,0GHz – Turbo 3.7GHz (64 Kerne/128 Threads)
  - 512 GB ECC RAM
- **2022 – 12 GPU-Knoten**
  - CPU: 2x AMD® EPYC® 7713 @ 2,0GHz – Turbo 3.7GHz (64 Kerne/128 Threads)
  - GPU: 8x NVIDIA **Tesla A30** (10.752 CUDA cores, 336 Tensor cores, 24GB ECC HBM2 RAM)
  - 1 TB ECC RAM
- **2020 – 23 GPU-Knoten**
  - CPU: 1x AMD® EPYC® 7551P @ 2,0GHz – Turbo 3,0GHz (32 Kerne/64 Threads)
  - 8x Nvidia **RTX 2080 Ti** (4352 CUDA cores, 544 Tensor cores, 11GB GDDR6 RAM)
  - 512 GB ECC RAM
- **2020 – 8 GPU-Knoten**
  - CPU: 1x AMD® EPYC® 7551P @ 2,0GHz – Turbo 3,0GHz (32 Kerne/64 Threads)
  - 4x Nvidia **Tesla V100** (5120 CUDA cores, 640 Tensor cores, 32GB ECC HBM2 RAM)
  - 512 GB ECC RAM
- **2019 – 10 CPU-Knoten**
  - CPU: 2x AMD® EPYC® 7351 @ 2,4GHz – Turbo 2.9GHz (16 Kerne/32 Threads)
  - 256 GB ECC RAM

# REGIONALES WISSENSCHAFTLICHES RECHENZENTRUM



# ERFOLGREICHER PROJEKTVORSCHLAG KI-RECHENZENTRUM LEIPZIG

FÖRDERRICHTLINIE 1. RL – STEP REVIER NACH § 4 INVKG UND ART. 104B GG IN SACHSEN



# KI-RECHENZENTRUM LEIPZIG

ZIEL: INFRASTRUKTUR FÜR FORSCHUNG, INNOVATION UND TECHNOLOGIETRANSFER

Realisierungszeitraum	<ul style="list-style-type: none"><li>• 2022–2026</li></ul>
IT-Nutzfläche	<ul style="list-style-type: none"><li>• 1.000 m<sup>2</sup></li></ul>
IT-Leistung	<ul style="list-style-type: none"><li>• mind. 3 Megawatt (MW)</li></ul>
Beteiligte Forschungseinrichtungen	<ul style="list-style-type: none"><li>• 2 Fraunhofer-Einrichtungen (IZI, IMW)</li><li>• 5 Leibniz-Institute (GWZO, Simon Dubnow, IfL, IOM, TROPOS)</li><li>• 3 Max-Planck-Institute (MPI CBS, MPI EVA, MPI MIS)</li><li>• Deutsches Biomasseforschungszentrum (DBFZ)</li><li>• Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ)</li><li>• Institut für Angewandte Informatik e. V. (InfAI) / KI-Hub Sachsen</li></ul>
Regionale Wirtschaft	<ul style="list-style-type: none"><li>• u.a. von c-LEcta GmbH, CO.DON AG, Data Virtuality GmbH, eccenca GmbH, evermind GmbH, IDT Biologika GmbH, GISA GmbH, IT25 GmbH, ITSonix custom development GmbH, Motic GmbH, Navigo Proteins GmbH, LVV Leipziger Versorgungs- und Verkehrsgesellschaft mbH, Lecos GmbH, Medialine AG, Siemens AG, SNAP IT GmbH, Softline AG, SPIE GmbH, SVA GmbH, Tcell Tolerance GmbH, vital.services GmbH, Web Data Solutions GmbH</li></ul>





UNIVERSITÄT  
LEIPZIG

# VIELEN DANK!

**Dr. Stefan Kühne**

Dittrichring 18–20, 04109 Leipzig

T +49 341 97-33303 F +49 341 97-33399

E-Mail [stefan.kuehne@uni-leipzig.de](mailto:stefan.kuehne@uni-leipzig.de)

Web <https://urz.uni-leipzig.de>