

Einige Hinweise zur Nutzung des HPC-Clusters HILBERT

1. Kurs zur Nutzung des HPC-Clusters

Es findet in der Regel einmal pro Semester ein 2x2stündiger Einführungskurs zum HPC-Cluster HILBERT statt. Bitte beachten Sie Hinweise auf den Kurs-Seiten des ZIM im Web oder in den Fortbildungsangeboten der HHU für das jeweilige Semester. Grundkenntnisse in Linux sowie Anmeldung per E-Mail an raub@hhu.de sind Teilnahmevoraussetzungen.

2. Einloggen

Zugang zum HPC Cluster ist über **hpc.rz.uni-duesseldorf.de** (134.99.128.39) per Secure Shell möglich. Sofern man sich von einem Windows-PC aus einloggt und die Grafik-Ausgabe vom Linux-Cluster aus nutzen möchte, ist eine X-Window-Emulation wie z.B. X-Win32 erforderlich.

3. Batch-System

Der HPC-Cluster darf ausschließlich für Batch-Jobs genutzt werden.

Das Batch-System basiert auf dem kommerziellen Workload Management System **PBS Professional** von Altair.

Links zu PBSpro:

Reference Guide: <http://resources.altair.com/pbs/documentation/support/PBSProRefGuide12.2.pdf>

User Guide: <http://resources.altair.com/pbs/documentation/support/PBSProUserGuide12.2.pdf>

Die Batch-Jobs werden per Kommando ***qsub batch-skript*** gestartet.

Die Angabe der Job-Parameter (z.B. Walltime, Rechner-Architektur, Queue, Core-Anzahl, Kurzname des Projekts) erfolgt im Batch-Skript über Direktiven **#PBS**. Zu den Kommandos (**qsub**, **qstat**, **qdel**) siehe obige Guides und die Beispiele im Wiki.

Im Batch-Skript muss vor dem Aufruf von Programmen auf Compute Nodes das geeignete Environment mittels Kommandos vom Typ ***module load modul-name*** definiert werden. Entsprechende Module für fertige Anwendungen bzw. selbst kompilierte Programme werden auf dem Cluster zur Verfügung gestellt (siehe auch die Hinweise zu Modulen im Wiki). Beispiele:

module load Gaussian (Gaussian 09)

module load intel (Programm-Kompilation bzw. -Ausführung mit Intel-Compiler und –Libraries)

module load intelmpi (Programm-Kompilation bzw. -Ausführung mit Intel-MPI)

4. myJAM

Monitoring von Batch-Jobs ist möglich über das „Job Accounting and Monitoring System“ myJAM: **<https://myjam.uni-duesseldorf.de>**

Bitte beachten Sie aktuelle Ankündigungen und Warnungen auf den myJAM-Seiten, die Sie immer auch per E-Mail erhalten.

5. Web-Seiten zum HPC

Die Web-Seiten zum HPC in Verbindung mit dem HPC-Cluster befinden sich derzeit im Aufbau:

<http://www.zim.hhu.de/high-performance-computing.html>

6. Wiki zum HPC

Das Wiki zum HPC befindet sich ebenfalls im Aufbau:

<https://wiki.hhu.de/display/HPC>

7. Beratung, Fragen, Probleme

Fragen oder Mitteilungen über Probleme bitte per E-Mail-Ticket richten an: **hpc-support@hhu.de**

Unser HPC-Team unterstützt Sie auch gerne direkt bei der Umsetzung Ihres Projekts auf dem Cluster (s. Ansprechpartner auf der o.g. Web-Seite).

8. Veröffentlichungen unter Einsatz des HPC-Clusters

In Veröffentlichungen, zu denen Berechnungen auf dem HPC-System durchgeführt wurden, bitten wir Sie, den folgenden Satz unter "Acknowledgements" einzufügen:

Computational support and infrastructure was provided by the “Centre for Information and Media Technology” (ZIM) at the University of Düsseldorf (Germany)

Bitte senden Sie außerdem für Ihre Veröffentlichungen entsprechende Informationen einschließlich Abstract (PDF) per E-Mail an **hpc-support@uni-duesseldorf.de**.