Robin.Hofsaess@kit.edu



Karlsruher Institut für Technologie

Rechnernutzung WS23/24

@ bwUniCluster 2.0+GFB-HPC

Robin Hofsaess

Robin.Hofsaess@kit.edu

Overview

- 1) General Idea
- 2) How to VPN
- 3) How do I Get Access
- 4) How to Login and Use



bwUniCluster 2.0+GFB-HPC

- 848 nodes
- 119TB RAM
- more than 200 GPUs
- total: ca 1,4 PetaFLOPS

https://www.scc.kit.edu/dienste/bwUniCluster_2.0.php





Robin.Hofsaess@kit.edu

1) General Idea



- KIT/SCC provides different computing resources for teaching
- For Rechnernutzung (WS23/24), we want to try out the jupyter service of the bwUniCluster!
 - Some more information on the service can be found here
- In general: no difference to our <u>local jupytermachine@ETP</u>, but way more powerful and many more possibilities
- Can be accessed with KIT credentials and a token (see later)
- Access is only possible within the KIT network

Prerequisites

- You only need a web browser; independent of OS (Linux, Windows, Mac)
- The BWUniCluster is only available from KIT internally!
- You have different possibilities:
 - At campus:
 - <u>KIT WLAN</u> (not eduroam!)
 - KIT LAN (at institutes, bib, etc)
 - Physics pool PCs
 - At home:
 - A <u>VPN</u> is necessary



2) How to VPN?

What is a Virtual Private Network (**VPN**)?

"A **virtual private network** (**VPN**) is a mechanism for creating a secure connection between a computing device and a computer network, or between two networks, using an insecure communication medium such as the public Internet." (<u>Wikipedia</u>)

General information:

- de:
 - https://www.scc.kit.edu/dienste/vpn.php
 - <u>https://www.scc.kit.edu/dienste/openvpn.php</u>
- eng:
 - <u>https://www.scc.kit.edu/en/services/vpn.php</u>
 - https://www.scc.kit.edu/en/services/openvpn.php

FAQ:

- de: https://www.scc.kit.edu/dienste/vpn-faq.php
- eng: https://www.scc.kit.edu/en/services/vpn-faq.php

Installation and Usage Guide (Linux and Mac)

- 1) Install OpenVPN:
 - a) **Ubuntu**: *sudo apt-get update && apt-get install openvpn*
 - b) Fedora: sudo dnf update && dnf install openvpn (more info)
- 2) Download the configuration file <u>here</u> (download starts on click)
- 3) Run OpenVPN with: *sudo openvpn --config /path/to/config*
- 4) Use your credentials to log-in (uXXXX and password)
- 5) Don't forget to deactivate the VPN when you are done. ALL traffic is redirected over the VPN.

Mac OS: <u>https://www.scc.kit.edu/en/services/10102.php</u>

enVPN GUI

Installation and Usage Guide (Windows)

- 1) Download OpenVPN here for your windows version
- 2) Download the OpenVPN config here
- 3) Right-click on the OpenVPN icon
- 4) Log-in with your KIT credentials (uXXXX)
- 5) Don't forget to deactivate!





Bonus: SSH Tunnel and Socks Proxy

If you are already more familiar with Linux/ssh, you can use that instead of a VPN client:

- 1) \$ ssh -D 5000 fphctssh.physik.kit.edu
- 2) Configure a socks proxy in mozilla firefox:
 - a) go to settings -> connection settings
 - b) configure the socks5 as shown
 - c) now, all your traffic is redirected over the remote machine!
- 3) Cancel the ssh connection and set the proxy settings back to "no proxy" to stop

With this, you redirect **all** your traffic through the ssh tunnel.

Verbindungs-Einstellungen		×
Proxy-Zugriff auf das Internet konfigurieren		
Nein Proxy Die Brown Finstellungen für dieses Netzwark automatisch erkennen		
Die Proxy-Einsteilungen für dieses Netzwerk automatisch erkennen		
Proxy-Einstellungen des systems verwenden		
Manuelle Proxy-Konfiguration:		
HTTP-Proxy:	Port:	0
Diesen Proxy auch f ür HTTPS verwenden		
HTTPS-Proxy	Port:	0
SO <u>C</u> KS-Host: 127.0.0.1	Por <u>t</u> :	5000
Automatische Proxy-Konfigurations-Adresse:		
Kei <u>n</u> Proxy für:		
Beispiel: .mozilla.org, .net.de, 192.168.1.0/24		
Verbindungen mit localhost, 127.0.0.1/8 und ::1 werden nie über einen Proxy geleitet.		
Keine Authentifizierungsanfrage bei gespeichertem Passwort		
Bei Verwendung von SOCKS v5 den Proxy für DNS-Anfragen verwenden		
ОК	At	brechen

3) How Do I Get Access?

- After registering for the course in ILIAS, you are registered for the bwUniCluster by me / our team.
- We will inform you, when the accounts are ready
- The entitlement is valid until the end of the semester (31.04.24)
- When the exercises start, you must activate your access by yourself! (see next slides)
- The jupyterhub is always available for you! You can use it also for other courses (e.g. Praktikum).

<u>HERE</u>, you find a tutorial on how to get access to HaiCore (a different service, but the procedure should be similar!)

1) go to: <u>https://bwidm.scc.kit.edu/</u>

and choose Karlsruher Institut für Technologie(KIT)

Never Hattat für Technologie	Impressum Datenschutz 🎿 KIT 🔀 Deutsch 👻
Föderierte Dienste am	
Willkommen Sie benötigen ein gültig Wählen Sie Ihre Heimat	es Benutzerkonto bei einer teilnehmenden Organisationen, um föderierte Dienste nutzen zu können. organisation aus und klicken auf "Fortfahren" bzw. drücken die Returntaste.
Heimatorganisation me	rken:
Suchfilter:	
Heimatorganisation:	IDP HFBK Hamburg Hochschule für öffentliche Verwaltung und Finanzen Ludwigsburg Humbolt-Universität zu Berlin IPK Gatersleben ISM International School of Management Kiel Institut für Weltwirtschaft Internationale Psychoanalytische Universität Berlin (IPU) Jade Hochschule Universität Frankfurt Johannes Gutenberg-Universität Mainz Universität Würzburg Justus-Liebig-Universität Gießen Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

2) Login to your KIT account:

Kanuche instante für Rechninger	Impressum Datenschutz Ba Des SCC St	ırrierefreiheit 🔊 KIT tellenangebote 🕋
Shibboleth Identity Provider		
Anmelden Sie wurden von dem Serviceprovider Föderierte Dienste KIT-Account (z.B. ab1234 als Mitarbeiter oder uxxxx als Benutzername Passwort:	am KIT hierher weitergeleitet und befinden sich nun auf einem Server des KIT. Bitte melden Sie sich mit Ihrem Student) und Ihrem Passwort an. Wenn Ihr Computer in der KIT-Domäne angemeldet ist, bzw. Kerberos unterstützt, können Sie sich mit Ihrem Windows Konto anmelden.	1

Die oben bezeichnete Webseite des Serviceanbieters bittet Sie, sich bei Ihrer Heimateinrichtung anzumelden.

Sie bekommen auf der Folgeseite die Daten angezeigt, um deren Übermittlung der Serviceprovider bittet. Sie können dies bestätigen und damit den Vorgang fortsetzen oder durch Schließen des Fensters abbrechen. Haben Sie denselben Service bereits einmal genutzt, werden Sie nur dann erneut nach einer Bestätigung gefragt, wenn sich der Datenumfang oder der Name des Serviceanbieters geändert hat. Wenn Sie auf jeden Fall nochmal sehen möchten, welche Daten zur Übermittlung vorgesehen sind, aktivieren Sie bitte nachstehende Option.

🗆 Bitte zeige mir für diesen Serviceprovider erneut an, welche Daten gesendet werden sollen.

- 3) You need a **Token** and an **entitlement**!
 - If both are missing, you see the following page:
 - The entitlement will be added by **us**!

The Token, you need to enable!

Impressum Datenschutz 🛚 KIT 🖶 Deutsch 👻

Übersicht Registrierte Dienste Dienste 🕋



Registrieren: bwUniCluster 2.0

Sie erfüllen ein oder mehrere Zugangsvorraussetzungen für diesen Dienst nicht. Bitte kontaktieren Sie in diesem Fall den Support / Servicedesk Ihrer Heimatorganisation.

Fehler bwUniCluster Entitlement wird nicht von der Heimatorganisation geliefert Fehler Für diesen Dienst ist es notwendig einen zweiten Faktor einzurichten. Bitte richten Sie sich hier einen zweiten Faktor ein.

Um sich für den Dienst zu registrieren, müssen Sie den folgenden Nutzungsbedingungen zustimmen.

Nutzungsbedingungen bwUniCluster - Version 3 (21. August 2020)

Nutzungsbedingungen bwUniCluster 2.0 - Version 3 (21. August 2020)

Nutzungsregeln und rechtliche Bestimmungen

Mit der Registrierung für den bwUniCluster erkennen Sie die "Ordnung für die digitale Informationsverarbeitung und Kommunikation" (lutk, siehe http://www.scc.kit.edu/si/luk-ordnung) des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) sowie die Nutzungsordnung des jeweiligen Standortes, über den Sie Zugriff auf den bwUniCluster erhalten haben, a.

Zusätzlich sind die Bestimmungen des Außenwirtschaftsgesetzes (AWG) und der Außenwirtschafts-Verordnung (AWV) (siehe siehe http://www.kit.edu /downloads/AmtlicheBekanntmachungen/2013_AB_036.pdf und http://www.ausfuhrkontrolle.info @) einzuhalten. Bei Fragen wenden Sie sich bitte an die Verwaltung ihres Heimatstandortes oder ihren lokalen bwHPC-Standortvertreter.

Verstöße gegen die Benutzerrichtlinien, unsachgemäße oder missbräuchliche Benutzung des Systems oder Verstöße gegen gesetzliche Bestimmungen können zu einer Sperrung des Zugangs oder zu zivil- bzw. strafrechtlichen Konsequenzen führen.

Danksagung

Activate Access To Jupyter@UC2: Tokens

To enable tokens in your account, visit: https://my.scc.kit.edu/token

Karbruher Institut fo	r technologie	Konto/KIT-Account	Passwortänderung	Tokenverwaltung	Hom De- / Pseudonymisierung	e Impressum E-Mail / Spam	Datenschutz E Bild für KIT-Card	Barrierefreiheit Siten	ap الله KIT J Hilfe / Kontakt	🖶 EN
	SCC - Self-Service-Portal									
	Startseite > Tokenverwaltung									
							é	abmelden		
	Tokenmanage	ement								
	Tokens Hilfe									
	Neues Token									



Activate Access To Jupyter@UC2: Tokens

and click on "new token" and then "start"

Karbruher Institut f	T ir Fechnologie	Konto/KIT-Account	Passwortänderung	Tokenverwaltung	Hom De- / Pseudonymisierung	e Impressum E-Mail / Spam	Datenschutz E Bild für KIT-Card	Barrierefreiheit Sitema Cloud-/SW-Nutzung	ap 회 KIT Hilfe / Kontakt	🖶 EN
	SCC - Self-Service-Portal									
	Startseite > Tokenverwaltung									
							a	abmelden		
	Tokenmanage	ement								
	Neues Token									
	Smartphone-Token KIT-Tol	ken Y	ubikey B	ackup-TAN-Liste						
	Neues Smartphon	e-Token								
	Hier können Sie Ihr Smartphone	als Token registrie	eren. Dazu benötig	jen Sie						

Hier konnen Sie Ihr Smartphone als Token registrieren. Dazu benotigen Sie eine entsprechende App nach RFC 6238. Für weitere Details zu den Apps folgen Sie bitte den Links.

- Allgemeine Seite zu Token am KIT
- Anleitung f
 ür Smartphone Token

Wenn Sie auf Starten klicken, wird das Token erstellt und ein QR-Code angezeigt. Diesen müssen Sie mit der App auf dem Smartphone erfassen.

Starten

Activate Access To Jupyter@UC2: Tokens

You now get a QR code that you have to scan with an authenticator app (e.g. google authenticator). And type in the presented token for confirmation.

For more info: see <u>Smarphone-Tokens</u> and <u>Info</u>

Karbruher Institut fr	E Tethnologie	Konto/KIT-Account	Passwortänderung	Tokenverwaltung	Hom De- / Pseudonymisierung	e Impressum E-Mail / Spam	Datenschutz E Bild für KIT-Card	Barrierefreiheit Sitem Cloud-/SW-Nutzung	ap 🔊 KIT Hilfe / Kontak	t
	SCC - Self-Service-Portal									
	Startseite > Tokenverwaltung						_			
	Tokenmanage	ement					a	bmelden		
	Token bestätigen									
	Bitte geben Sie den aktuellen Code des	Tokens ein, um es zu a	iktivieren.							
	Tokencode									
	Zurück Prüfen									

Activate Access To Jupyter@UC2: Tokens

If it worked, you now see:



- 4) With token and entitlement, you now can activate your access to UC2. For that, visit again: <u>https://bwidm.scc.kit.edu/</u> and scroll down to "Folgende Dienste stehen zur Verfügung" and click on "Registrieren"
- 5) Accept the Terms of Use and click on "Registrieren"
- 6) Set a SECURE password, at least 12 characters

Now, you should be able to login to the bwUniCluster!

4) How to Login and Use?

- A full manual can be found HERE
- To login, go to: <u>https://uc2-jupyter.scc.kit.edu/</u> (remember to use a VPN ;-))



Jupyter@UC2

Jupyter@UC2 Overview Jupyter Software Stacks

Jupyter@UC2 ¶

Login

The login to JupyterHub consists of the following steps, you will be redirected accordingly:

- Click on "Enter JupyterHub"
- Choose your home organization
- Enter username and password
- Enter the one-time password (second factor)

Login +)

Table of contents

Login Documentation Software Software stacks Installing own software Contact

How to Login and Use?

<u>ka</u> Jup	rter@UC2	Q. Contraction of the second se
Jupyter@UC2 Overview Jupyter Software Stacks	Jupyter@UC2 Login The login to JupyterHub consists of the following steps, you will be redirected accordingly:	Table of contents Login Documentation Software Software stacks Installing own software
*	 Click on "Enter JupyterHub" Choose your home organization Enter username and password Enter the one-time password (second factor) 	
	 bwHPC Wiki: Information about the use of bwUniCluster 2.0+GFB-HPC. Jupyter Wiki: General information about Jupyter and its use on the bwUniCluster. Service Description: Service description on the KIT-SCC website. 	
	Software Software stacks The software for data analysis and machine learning is developing rapidly. We therefore provide an up-to-date overview	w of the
https://www.nhr.k	it.edu/userdocs/jupyter/images/anmeldung_neu.	gif

Robin.Hofsaess@kit.edu

How to Login and Use? – Step-by-step –



How to Login and Use? – Step-by-step –

- choose Karlsruher Institut für Technologie (KIT)



Impressum Datenschutz 🔬 KIT 🌐 Deutsch 🔻

Föderierte Dienste am KIT Willkommen Sie benötigen ein gültiges Benutzerkonto bei einer teilnehmenden Organisationen, um föderierte Dienste nutzen zu können. Wählen Sie Ihre Heimatorganisation aus und klicken auf "Fortfahren" bzw. drücken die Returntaste. Heimatorganisation merken: Suchfilter: HUCHSCHURE Neu-UIII Heimatorganisation: IDP HFBK Hamburg Hochschule für öffentliche Verwaltung und Finanzen Ludwigsburg Humboldt-Universität zu Berlin IPK Gatersleben ISM International School of Management Kiel Institut für Weltwirtschaft Internationale Psychoanalytische Universität Berlin (IPU) Jade Hochschule Universität Frankfurt Johannes Gutenberg-Universität Mainz Universität Würzburg Justus-Liebig-Universität Gießen Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

FORTFAHREN

How to Login and Use? – Step-by-step –

- login with KIT account

Contract for Relations	Impressum Datenschutz Barrierefreiheit 🔊 KIT Das SCC Stellenangebote 👫
Shibboleth Identity Provider	
Anmelden Sie wurden von dem Serviceprovider Föderierte Dienste KIT-Account (z.B. ab1234 als Mitarbeiter oder uxxxx als	e am KIT hierher weitergeleitet und befinden sich nun auf einem Server des KIT. Bitte melden Sie sich mit Ihrem Student) und Ihrem Passwort an. Wenn Ihr Computer in der KIT-Domäne angemeldet ist. bzw. Kerberos unterstützt, können Sie sich mit Ihrem Windows Konto anmelden. WINDOWS LOGIN VERWENDEN

Die oben bezeichnete Webseite des Serviceanbieters bittet Sie, sich bei Ihrer Heimateinrichtung anzumelden.

Sie bekommen auf der Folgeseite die Daten angezeigt, um deren Übermittlung der Serviceprovider bittet. Sie können dies bestätigen und damit den Vorgang fortsetzen oder durch Schließen des Fensters abbrechen. Haben Sie denselben Service bereits einmal genutzt, werden Sie nur dann erneut nach einer Bestätigung gefragt, wenn sich der Datenumfang oder der Name des Serviceanbieters geändert hat. Wenn Sie auf jeden Fall nochmal sehen möchten, welche Daten zur Übermittlung vorgesehen sind, aktivieren Sie bitte nachstehende Option.

Bitte zeige mir für diesen Serviceprovider erneut an, welche Daten gesendet werden sollen.

How to Login and Use? – Step-by-step –

- enter Token



Impressum Datenschutz 🛛 KIT 🌐 Deutsch 💌

Übersicht Registrierte Dienste Dienste 倄



Login mit zweitem Faktor

Ihre Token werden an dieser Stelle nur angezeigt. Um Änderungen vorzunehmen besuchen Sie bitte die folgende Webseite: https://my.scc.kit.edu/token

Um die angeforderte Aktion durchzuführen, muss ein zweiter Faktor eingegeben werden. Bitte geben Sie einen beliebigen zweiten Faktor aus der unten stehenden Liste ein um fortzufahren.



C Logout

How to Login and Use? – Step-by-step –



Success!

Select your resources

The grayed out fields contain a reasonable preselection of resources. Other values can be selected in advanced mode.

Number of CPU-cores:	1 ~
Number of GPUs:	0 ~
Runtime:	0.5 hour v
Partition:	single v
Amount of memory:	2GB v
JupyterLab-Basemodule:	jupyter/tensorflow v
Auto-Reservation:	
Advanced Mode:	
Container Mode:	

Spawn

How to Login and Use? – Request Resources –

- For the course, 1 CPU and 2GB of RAM should be sufficient
- If you experience any problems, you also can request more, but ideally only what you need (-> don't go over 5core/10G)
 - and please inform us if there are any problems!
- For the exercises, we will only reserve 1core/2G slots, for more you may have to wait
- If you run into a **timeout** when spawning, try to use more cores for the first time (from then on, the containers should be cached)
- general info:

https://www.nhr.kit.edu/userdocs/jupyter/login/#prioritized-access-to-computin g-resources-on-bwunicluster-20

How to Login and Use? - Request Resources -

 For the time during the exercises, we will reserve slots

- This will decrease waiting times significantly

Jupyterhub Home Token



Select your resources

The grayed out fields contain a reasonable preselection of resources. Other values can be selected in advanced mode.

Number of CPU-cores:	1 🗸
Number of GPUs:	0 ~
Runtime:	4 hours 🗸
Partition:	single v
Amount of memory:	2GB 🗸
JupyterLab-Basemodule:	jupyter/base v
Auto-Reservation:	
Advanced Mode:	
Container Mode:	

Spawn

 Runtime: 2 or 4 hours
 choose Advanced Mode (see next slide)

How to Login and Use? - Reservations: Advanced Mode -

Cjupyterhub Home Token



Reservation:

Mo. und Di. 14:00 - 18:00

Monday: "etp-rn1" Tuesday: "etp-rn2"



The grayed out fields contain a reasonable preselection of resources. Other values can be selected in advanced mode.

1 ~
0 ~
4 hours v
single v
2GB ~
jupyter/tensorflow ~

Spawn

NOTE: only use the reservation during the exercise hours! Else, you will get an error!

How to Login and Use? – Reservations: Container Mode –





Container Mode: we want to use our own course container

Select your resources

The grayed out fields contain a reasonable preselection of resources. Other values can be selected in advanced mode.

Number of CPU-cores:	1 🗸
Number of GPUs:	0 ~
Runtime:	4 hours v
Partition:	single v
Amount of memory:	2GB v
JupyterLab-Basemodule:	jupyter/tensorflow v
Auto-Reservation:	
Advanced Mode:	
Reservation:	
Account:	
Mount LSDF:	
Use BEEOND:	
Container Mode:	

Spawn

How to Login and Use? – Reservations: Container Mode –

Select your resources

The grayed out fields contain a reasonable preselection of resources. Other values can be selected in advanced mode.

	Number of CPU-cores:	1	~
sis.sqsh	Number of GPUs:	0	~
	Runtime:	4 hours	~
	Partition:	single	×
	Amount of memory:	2GB	×
	JupyterLab-Basemodule:	Container Mode	×
	Auto-Reservation:		
	Advanced Mode:		
	Reservation:		
	Account:		
	Mount LSDF:		
	Use BEEOND:		
	Container Mode:		
	container-image		
	container-name		
	container-mount-home		
	container-mounts= <default mounts=""></default>		
	no-container-remap-root		

- To select our course container, enter for "--container-image": /pfs/work7/workspace/scratch/wm7309-Rechnernutzung/jeppelt+etp_basis.sc

NOTE: when copying the path, make sure that there are **no whitespaces**!!

- As "--container-name", please use RN2324

Finally: Spawn!

Jupyterhub Home Token

Your server is starting up.

You will be redirected automatically when it's ready for you.

Pending in queue...

Event log

Course container: https://hub.docker.com/r/jeppelt/etp_basis

How to Login and Use? – Start a Notebook –

To start a notebook, click on the python icon under *Notebook*

For a console, e.g. for file transfer, choose the *Terminal*



Course Files

- We provide some tutorials:

- Spickzettel für Jupyter: JupyterCheatsheet.ipynb
- Einführung in Python: PythonIntro.ipynb
- Spickzettel für Python: PythonCheatsheet.ipynb
- Grundlagen zur Verwendung von matplotlib: *matplotlibTutorial.ipynb*
- Grundlagen der Statistik: IntroStatistik.ipynb
- Fehlerrechnung im Physikalischen Praktikum: Fehlerrechnung.ipynb
- You can get them with:
 - \$ wget <u>https://web.etp.kit.edu/~rhofsaess/quast_notebooks.tar.gz</u> and <u>untar</u> them with:
 \$ tar -xzvf quast_notebooks.tar.gz
- How to get the exercise sheets:
 - they are available at the ETP gitlab; you can get them from a terminal with:
 \$ git clone <u>https://gitlab.etp.kit.edu/Lehre/rn_forstudents.git</u> (note: "_" between *rn* and *forstudents*!) and update the git repo regularly with \$ git pull

Some Words on Backups/ File Persistence

- Your files are saved locally on UC2 in your home directory: /home/kit/stud/<kit-kürzel>
- This directory is only available until the end of semester (31.04.2024)
- I would recommend to backup your files somewhere else, if you want to keep them!
- Option 1: use a terminal to *scp/rsync* the files to e.g. the physics pool, by:
 - \$ rsync -a ~/dir_to_copy <user>@fphctssh.physik.kit.edu:~/<destination_path>
 - if you have produced a lot of small files, you should consider *tar*ing them with:
 \$ tar -cvzf <name>.tar.gz <folder>
- Option 2: <u>LSDF</u> (does **not** work for everyone **yet**!)
 - if you have access and want to use LSDF, you need to tick "Mount LSDF" in "Advanced Mode" when requesting a resource

Any questions?

- "Beratungstutorium" on **Tuesday**, **7.11.23 from 15:00-16:30** at the Physik-Poolraum
- You can also send me an email if you encounter any problems!

Backup: I cannot spawn a resource (Timeout)

Sometimes it happens that the extraction takes too long and you run into a timeout when requesting a resource. In this case you can try to increase the resource request (e.g. 10 cores) or try the following:

- login to bwUniCluster via ssh (you need to set a password in **bwidm**):
 \$ ssh <user>@uc2-login1.scc.kit.edu with OTP (token) and your password
- Create a container with a name (e.g. RN2324) that you later specify in
 --container-name:

\$ enroot create --name pyxis_RN2324 /pfs/work7/workspace/scratch/wm7309-Rechnernutzung/jeppelt+etp_basis.sqsh

- Note: if it already exist, first delete the existing: \$ rm -rf ~/.local/share/enroot/<container> and retry
- 4) Request a resource with the given container name

If you have any problems: send me an email or ask one of the tutors!