

FH Aachen University of Applied Sciences
Campus Jülich

Department of Medical Engineering and
Technomathematics

Building an In Situ Coupling Framework of Simulations and Analysis in Scientific Workflows for Modular Supercomputing

A thesis submitted in partial fulfillment
of the requirements for the degree of

Master of Science

Kim Sontheimer

Jülich, October 29, 2018

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die Masterarbeit mit dem Thema **TITEL** selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, alle Ausführungen, die anderen Schriften wörtlich oder sinngemäß entnommen wurden, kenntlich gemacht sind und die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Fassung noch nicht Bestandteil einer Studien- oder Prüfungsleistung war. Ich verpflichte mich, ein Exemplar der Masterarbeit fünf Jahre aufzubewahren und auf Verlangen dem Prüfungsamt des Fachbereiches Medizintechnik und Technomathematik auszuhändigen.

Ort und Datum

Unterschrift

Diese Arbeit wurde betreut von:

Prof. Dr. rer. nat. Johannes Grotendorst
M.Sc. Wouter Klijn

Diese Arbeit wurde erstellt am
Jülich Supercomputing Centre



Abstract

abstract

Contents

1. Introduction	1
2. Methods and Software	3
2.1. Nest - Neural Simulator Tool	3
2.2. Elephant - Electrophysiology Analysis Toolkit	3
2.3. Online Analysis	3
2.4. Modular Supercomputing	3
3. Design	5
3.1. Design of the Framework	5
3.2. Proof of Concept	5
4. Implementation and Results	7
4.1. Results I	7
4.2. Results II	7
4.3. Summary	7
5. Conclusion	9
5.1. Discussion	9
5.2. Outlook	9
A. Configuration JURECA	I

List of Figures

List of Tables

1. Introduction

2. Methods and Software

2.1. Nest - Neural Simulator Tool

2.2. Elephant - Electrophysiology Analysis Toolkit

2.3. Online Analysis

2.4. Modular Supercomputing

3. Design

3.1. Design of the Framework

3.2. Proof of Concept

4. Implementation and Results

4.1. Results I

4.2. Results II

4.3. Summary

5. Conclusion

5.1. Discussion

5.2. Outlook

A. Configuration JURECA



Hardware Eigenschaften JURECA¹:

- 1872 Rechenknoten
 - Pro Knoten: Zwei Intel Xeon E5-2680 v3 Haswell 12-Kern Prozessoren mit 2,50 GHz
 - 75 Knoten mit zwei NVIDIA K80 GPUs (2×4992 CUDA Kerne, 2×24 GiB GDDR5 Speicher)
 - DDR4-SDRAM (2133 MHz) Technologie:
 - 1605 Knoten mit 128 GiB Speicher
 - 128 Knoten mit 256 GiB Speicher
 - 64 Knoten mit 512 GiB Speicher
- 12 Visualisierungsknoten
 - Zwei Intel Xeon E5-2680 v3 Haswell CPUs pro Knoten
 - Zwei NVIDIA K40 GPUs pro Knoten
 - 10 Knoten mit 512 GiB Speicher
 - 2 Knoten mit 1024 GiB Speicher
- Loginknoten mit 256GiB Speicher pro Knoten
- 45216 CPU Kerne
- 100 GiB pro Sekunde Speicheranbindung

¹http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/Expertise/Supercomputers/JURECA/JURECA_node.html,
Zuletzt besucht am 10. August 2017