

JupyterHub@LUH Rechencluster für die Lehre

Gizo Nanava
Gruppe "*Scientific Computing*"
Leibniz Universität IT Services

LUH Rechencluster@LUIS

Die Gruppe "Scientific Computing" am LUIS betreibt einen Rechencluster zur Unterstützung rechenintensiver Forschungs- und Lehrtätigkeiten an der LUH:

- ➔ Mehrere parallele Rechensysteme
- ➔ Knoten mit großem Hauptspeicher
- ➔ GPU-Server und 3D-Visualisierungsknoten

Anzahl der Rechenknoten ~ 400

Gesamtzahl der CPU-Kerne ~ 16.000

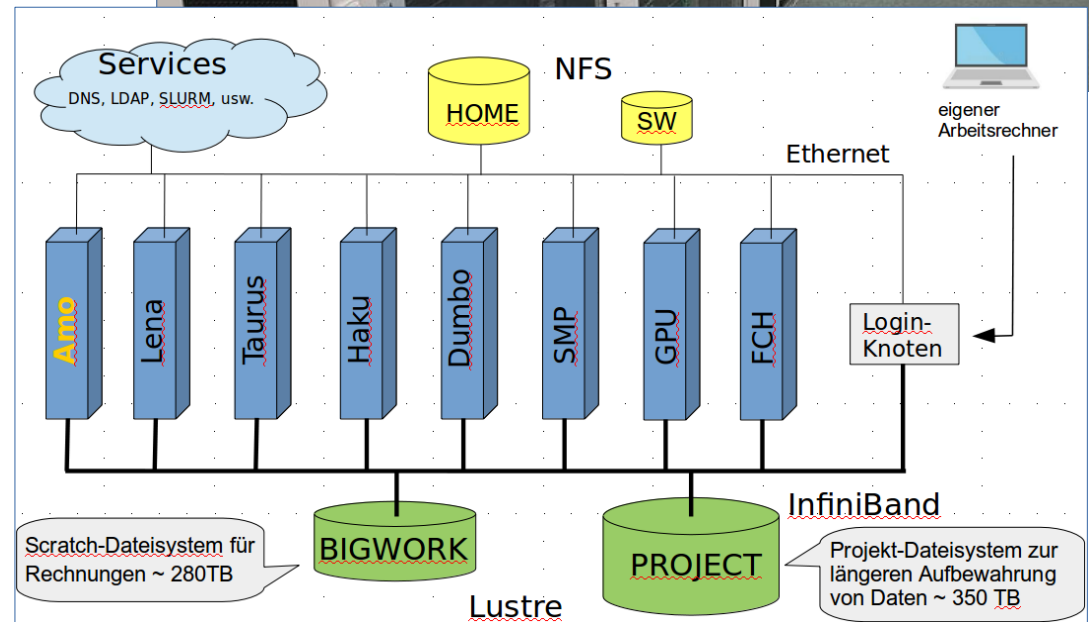
Gesamter Hauptspeicher ~ 90 TB

Knotenverbindungen: InfiniBand & Intel OPA

Lustre (Work/Project) & NFS (Home/Software)

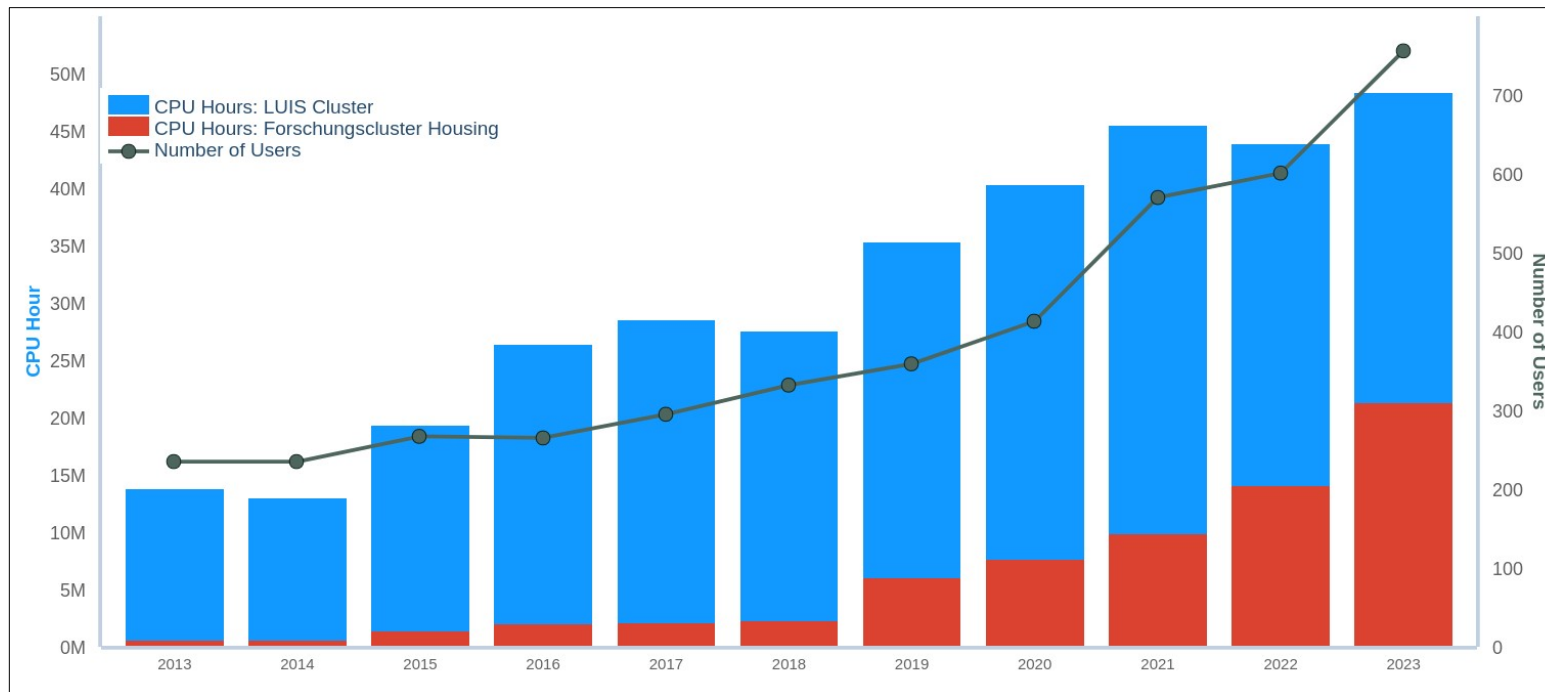
SLURM Ressourcenmanager & Job Scheduler

EasyBuild zur Softwareinstallation



LUH Rechencluster@LUIS: Verbrauchte CPU-Stunden pro Jahr

- Beitrag von Forschungscluster Housing (**FCH**) und "regulären" Teilclustern
- Anzahl der Nutzer - ohne zu Lehrzwecken erstellte Benutzernamen



Das "Scientific Computing" Team ist verantwortlich für

- Planung, Anschaffung, Aufbau und Wartung von Rechenclustern und zugehörigen Speichersystemen
- Nutzer-Support durch Einführungskurse, Dokumentation und individuelle Beratung per Ticketsystem

JupyterHub@LUH-Cluster: Motivation

Letztes Jahr erhielten wir von einer der FCH-Arbeitsgruppen die Anfrage, eine Umgebung für die Durchführung von **Lehrveranstaltungen** einzurichten

- Kursaufgaben werden von Kursleitern als Jupyter-Notebooks verteilt
- Aufgaben werden von Studierenden mithilfe der Rechenressourcen des LUH-Clusters erledigt
- Verteilung, Sammlung und Übermittlung von Aufgaben und der zugehörigen Software muss in dieser einheitlichen Umgebung über eine einfache Schnittstelle erfolgen
- Die Umgebung muss über einen Webbrowser zugänglich sein
- Die Authentifizierung bei der Plattform muss über den Cluster-Account erfolgen

JupyterHub@LUH-Cluster: Jupyter Notebook



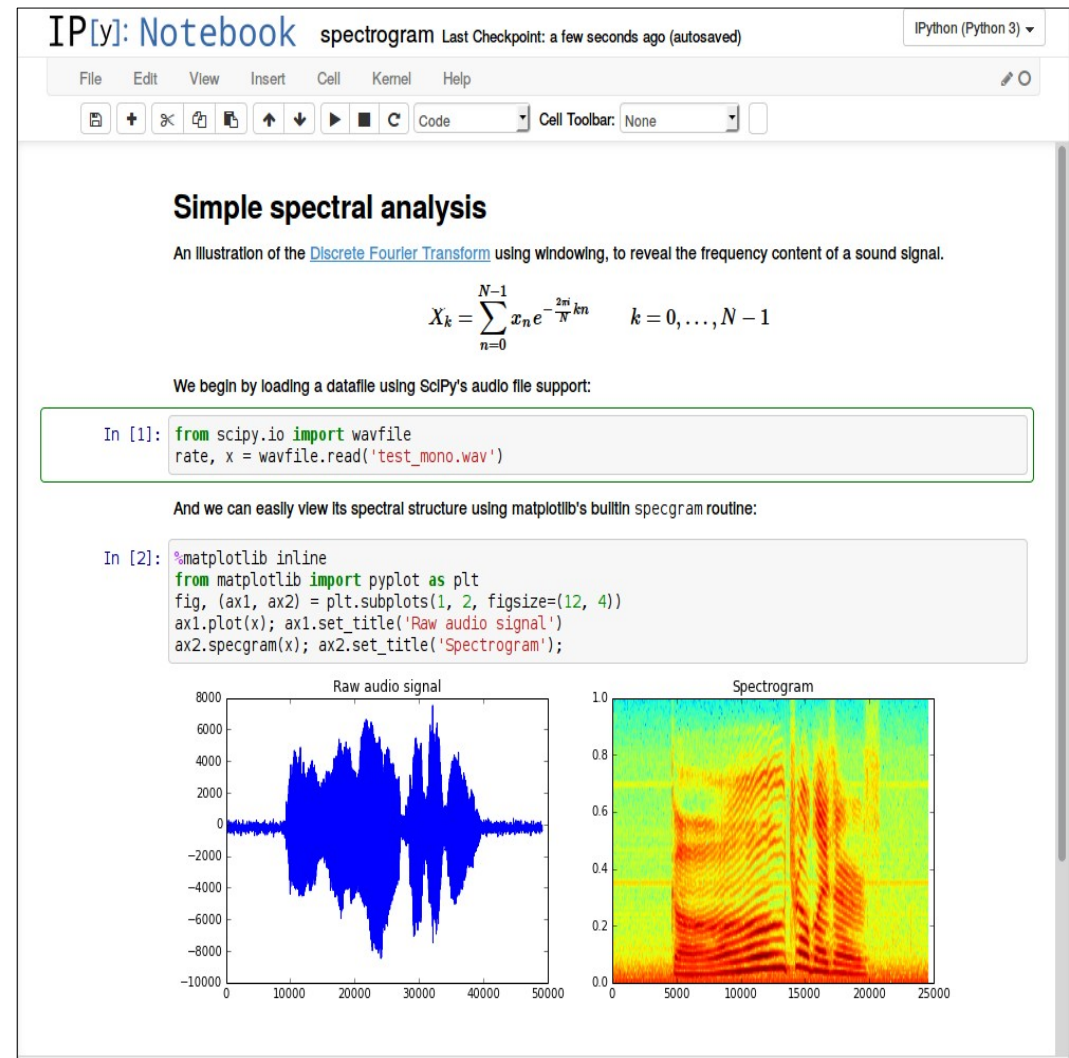
- Jupyter Notebook ist eine webbasierte interaktive Freie & Quelloffene-Rechenumgebung die

- ausführbaren Code
- Gleichungen (LaTeX)
- Visualisierungen (Bild, Video, Ton, interaktive 3D-Plots)
- formatierten Text (Markdown)

in einem JSON-Dokument vereint

- Jupyter-Notebooks unterstützen mehr als 100 Programmiersprachen (sogenannte Kernels), darunter die Kernsprachen **Julia**, **Python**, **R** sowie Java, Matlab, C++ usw.

☺ **Wikipedia:** "Im Jahr 2021 ernannte Nature Jupyter zu einem von zehn Computerprojekten, die die Wissenschaft verändert haben"



JupyterHub & NbGrader

Die Anforderungen wurden durch den Einsatz des **JupyterHub** & **NbGrader** erfüllt

- **JupyterHub** ist eine webbasierte Freie-Quelloffene Plattform zur Bereitstellung von Jupyter-Notebooks für mehrere Benutzer, wodurch sie sich ideal für Lehr- und Lernzwecke eignen
 - JupyterHub erzeugt und verwaltet für jeden Benutzer einen separaten Jupyter-Notebook-Server über verschiedene Spawner: Docker, Batch, Kubernetes, etc
 - Unterstützt mehrere Authentifikatoren: PAM, LDAP, OAuth, Kerberos
 - Kann auch über die eigene REST-API aufgerufen werden
 - Eignet sich für kleine (< 100 Benutzer) Teams sowie für große Infrastrukturen
- **Nbgrader** ist ein Tool zum Erstellen und (automatischen) Bewerten von Aufgaben in den Jupyter-Notebooks
 - Kursleiter können Kursaufgaben sowohl über eine Jupyter-Notebook-Grafikoberfläche als auch über das Kommandozeilentool verwalten

LUH Rechencluster@LUIS

- JupyterHub@LUH-Cluster dient ausschließlich Lehrzwecken
- Jupyter-Tools für die Forschung werden über das Cluster-Webportal bereitgestellt

The screenshot displays the LUIS OnDemand Dashboard in a web browser. The URL bar shows `login.cluster.uni-hannover.de/pun/sys/dashboard/`. The dashboard header includes navigation links: Files, Jobs, Clusters, Interactive Apps, My Interactive Sessions, All Apps, Develop, Help, and a logged-in user status with a Log Out button.

The main content area is divided into two columns. The left column features the Leibniz Universität Hannover logo and a 'Getting started with OnDemand' section. Below this, it lists actions users can perform: creating, submitting, canceling, and monitoring sessions; opening terminal connections; browsing, editing, downloading, and uploading files; running noVNC Remote Desktop sessions; and running other preconfigured interactive applications. It also mentions compatibility with Google Chrome (90+) and Safari, and provides links to tutorial videos.

The right column contains a 'Search Computing Cluster' bar and a 'News' section. A modal window titled 'Interactive Apps' is open, showing a list of available applications: Cluster Remote Desktop, Abaqus/CAE, COMSOL Multiphysics, MATLAB, Mathematica, ParaView, Spyder, Jupyter (highlighted), and TensorBoard. The 'Jupyter' application is selected, displaying its configuration page.

The Jupyter configuration page shows the version '4bf9cf5' and a description: 'This app will launch a Jupyter server using Python on one LUIS Cluster compute node. Instructions on creating custom Jupyter kernels for your software environment.' It includes a dropdown for the 'Standard environment' (set to 'Conda: Miniconda3/2021.11 [Python-3.8]') and a 'Select Startup Directory' button. Configuration fields for 'Number of hours' (set to 1), 'Number of CPU cores' (set to 1), 'Amount of memory (in MB) per CPU core' (set to 2048), and 'Number of GPUs' (set to 0) are visible. A 'Launch' button is at the bottom.

JupyterHub@LUH-Cluster: Nutzungsbedingungen

Bei der Nutzung des **JupyterHub@LUH-Rechenclusters** sind die folgenden **Nutzungsbedingungen** einzuhalten

Support

- Da der JupyterHub-Dienst Teil des "*Scientific Computing*"-Dienstes ist, gelten die Regeln zur Nutzung der IT-Systeme und -Services des LUIS sowie die Beschreibung im Cluster-Wiki

Verfügbarkeit

- Der JupyterHub-Dienst steht zu den gleichen Rahmenbedingungen zur Verfügung wie die sonstigen Ressourcen des LUH-Rechenclusters. Eine ständige Verfügbarkeit des Dienstes kann nicht gewährleistet werden

Nutzung

- Der lediglich als Lehr- bzw. Lernmittel angebotene Dienst JupyterHub darf nur für Lehrveranstaltungen genutzt werden, die Ressourcen des LUH-Rechenclusters erfordern. Die Abnahme von Prüfungsleistungen mit und über JupyterHub ist ausgeschlossen

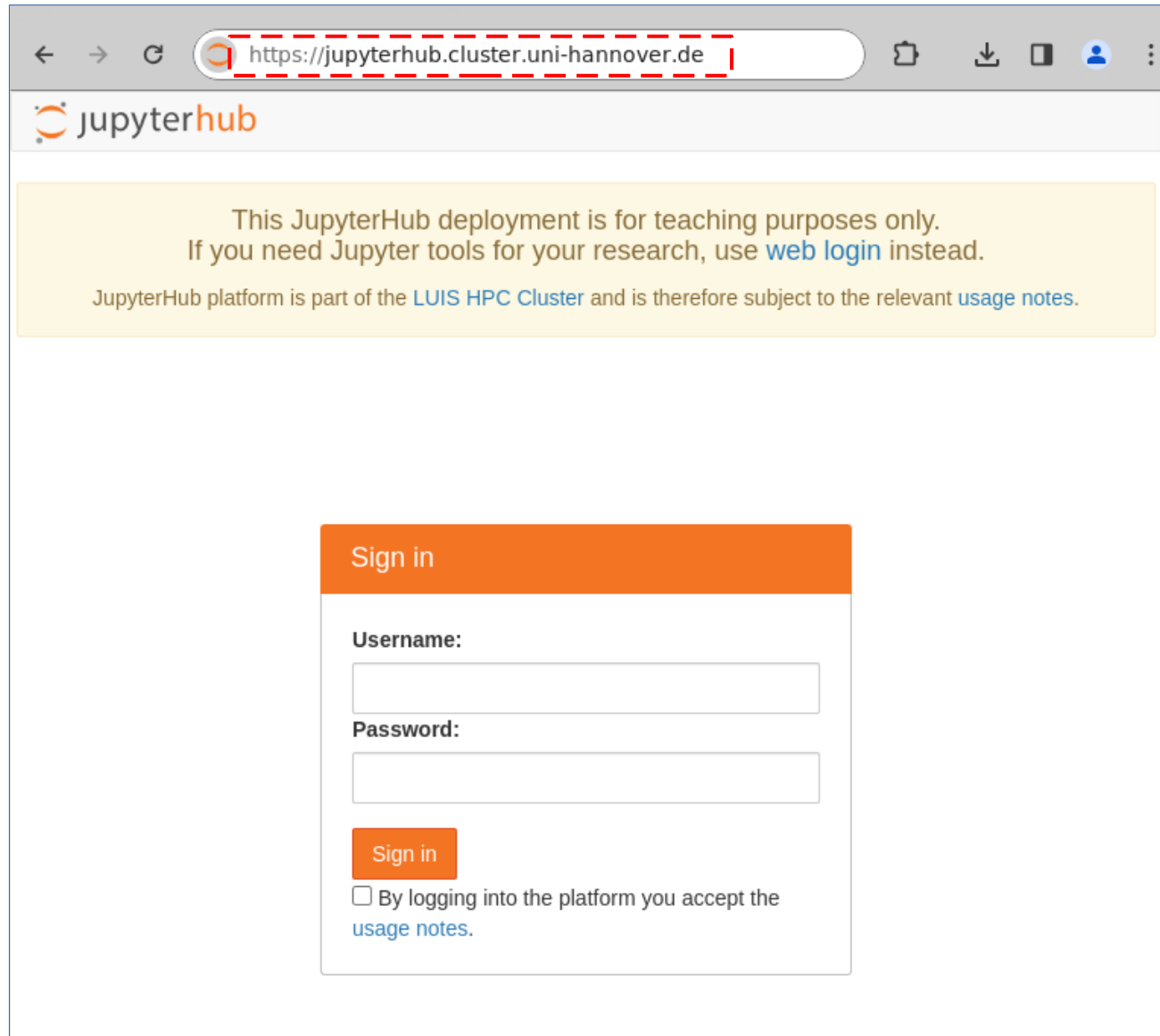
JupyterHub & NbGrader: Bereitstellung im LUH-Cluster

- **JupyterHub** läuft auf einer virtuellen Maschine mit 4 CPU-Kernen und 16 GB Speicher
 - Probebetrieb in den letzten beiden Semestern. Seit Okt. 2023 im Produktionsbetrieb
- Proxyserver (*configurable-http-proxy*) wird getrennt vom JupyterHub ausgeführt
 - Der Proxy leitet Anfragen vom Webbrowser an den JupyterHub-Server weiter
 - Laufenden Jupyter Notebooks müssen den JupyterHub-Neustart überstehen
- Es wird der eigenen Spawner (*CourseSpawner*) verwendet, der auf Batch- und Profile-Spawnern basiert
 - Jupyter Notebook-Server werden als SLURM-Job übermittelt und auf Cluster-Rechenknoten ausgeführt
- Die Parameter eines Kurses werden in einer separaten YAML-Datei gespeichert und beim Neustart des JupyterHubs validiert
 - Eine Änderung der Kurskonfiguration erfordert derzeit einen Neustart von JHub
- Derzeit unterstützt **NbGrader** nur klassische Jupyter-Notebooks

JupyterHub@LUH-Cluster: Nutzungsanweisung


- Ein Kurs muss zunächst auf der JupyterHub-Plattform registriert werden
- Hierzu die Kursleiter stellen dem Cluster-Team folgende Informationen zur Verfügung:
 - Kursname (der Name sollte keinen Doppelpunkt enthalten)
 - Cluster-Benutzername von mindestens einem Kursleiter
- Sobald der Kurs registriert ist, kann sich der Leiter bei JupyterHub anmelden und
 - Die Kurskonfiguration ändern: die Benutzernamen der Studenten und Kursleiter, Softwareumgebung über Conda, SLURM-Joboptionen, usw.
 - Kursjob einreichen und Aufgaben mit **FormGrader** – das Subsystem von NbGrader – verwalten: erstellen, bewerten, Feedback geben, usw.
- Studenten können sich auch bei JupyterHub anmelden und
 - ausgewählte Kursjob starten (d.h. einen SLURM-Job einreichen)
 - Aufgaben mit **Assignments** – das Subsystem von NbGrader – abrufen, sie ausarbeiten und zurücksenden sowie Feedback abrufen
- Kursleiter und Studenten haben nur Zugriff auf ihre Kurse

JupyterHub@LUH-Cluster: Login-Seite



The screenshot shows a web browser window with the address bar containing `https://jupyterhub.cluster.uni-hannover.de`. The page header features the JupyterHub logo. A yellow banner contains the following text: "This JupyterHub deployment is for teaching purposes only. If you need Jupyter tools for your research, use [web login](#) instead. JupyterHub platform is part of the [LUIS HPC Cluster](#) and is therefore subject to the relevant [usage notes](#)." Below this, a "Sign in" form is displayed with an orange header. The form includes fields for "Username:" and "Password:", a "Sign in" button, and a checkbox with the text "By logging into the platform you accept the [usage notes](#)."

← → ↻ `https://jupyterhub.cluster.uni-hannover.de` 📁 ⬇️ 📱 👤 ⋮

 jupyterhub

This JupyterHub deployment is for teaching purposes only.
If you need Jupyter tools for your research, use [web login](#) instead.
JupyterHub platform is part of the [LUIS HPC Cluster](#) and is therefore subject to the relevant [usage notes](#).

Sign in

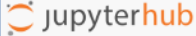
Username:

Password:

Sign in

☐ By logging into the platform you accept the [usage notes](#).

JupyterHub@LUH-Cluster: Homepage des Kursleiters


[Home](#)
[Token](#)
[Admin](#)
Logout

While using this JupyterHub platform, you agree to have read and accepted the [usage notes](#)

Available Courses

Python for beginners (Course ID: course112)

Start

Job Options of Selected Course

Number of hours
4:00:00

Number of nodes
1

Number of CPU cores
2

Amount of memory per CPU core
4gb

Instructors

Assigned Students

Course material location
/jupyterhub/courses/course112/course_dir

Course date
03.09.2023 - 08.10.2023

Comment
You learn how to use python for your everyday tasks

> Export course config
> Import course config

Running Course Jobs

Course name	SLURM JobID	Time left	Last activity	Actions
Python for scientific computing (Course ID: course111)	2262392	2:28:03	2 hours ago	connect stop

JupyterHub@LUH-Cluster: JSON-Konfigurationsdatei des Kurses

jupyterhub
Home
Token
Admin
Logout

course010.json

```

{
  "state": "active",
  "name": "Python for scientific computing",
  "comment": "Python for scientific computing",
  "teachers": [
    "username1, John, Chase, j.chase@uni-hannover.de",
    "username2, Juliet, Williams, williams@uni-hannover.de"
  ],
  "students": [
    "stud0001, Armaan, Nunez, nunez@stud.uni-hannover.de",
    "stud0002, Angelica, Vargas, angelica.vargas@stud.uni-hannover.de",
    "stud0003, Jago, Clements, clements@stud.uni-hannover.de",
    "stud0004, Suzanne, Barker, barker@stud.uni-hannover.de"
  ],
  "location": "/jupyterhub/courses/course010/course_dir",
  "start": "03.09.2023",
  "end": "08.12.2023",
  "job_options": " --time=04:00:00 --nodes=1 --cpus-per-task=4 --mem-per-cpu=4G --gres=gpu:1",
  "jupyter_notebook": {
    "autosave_interval": 10,
    "kernel_default": {
      "name": "Python Computing 2023",
      "conda_env": "/jupyterhub/courses/course010/conda_envs/python_computing_2023"
    }
  }
}

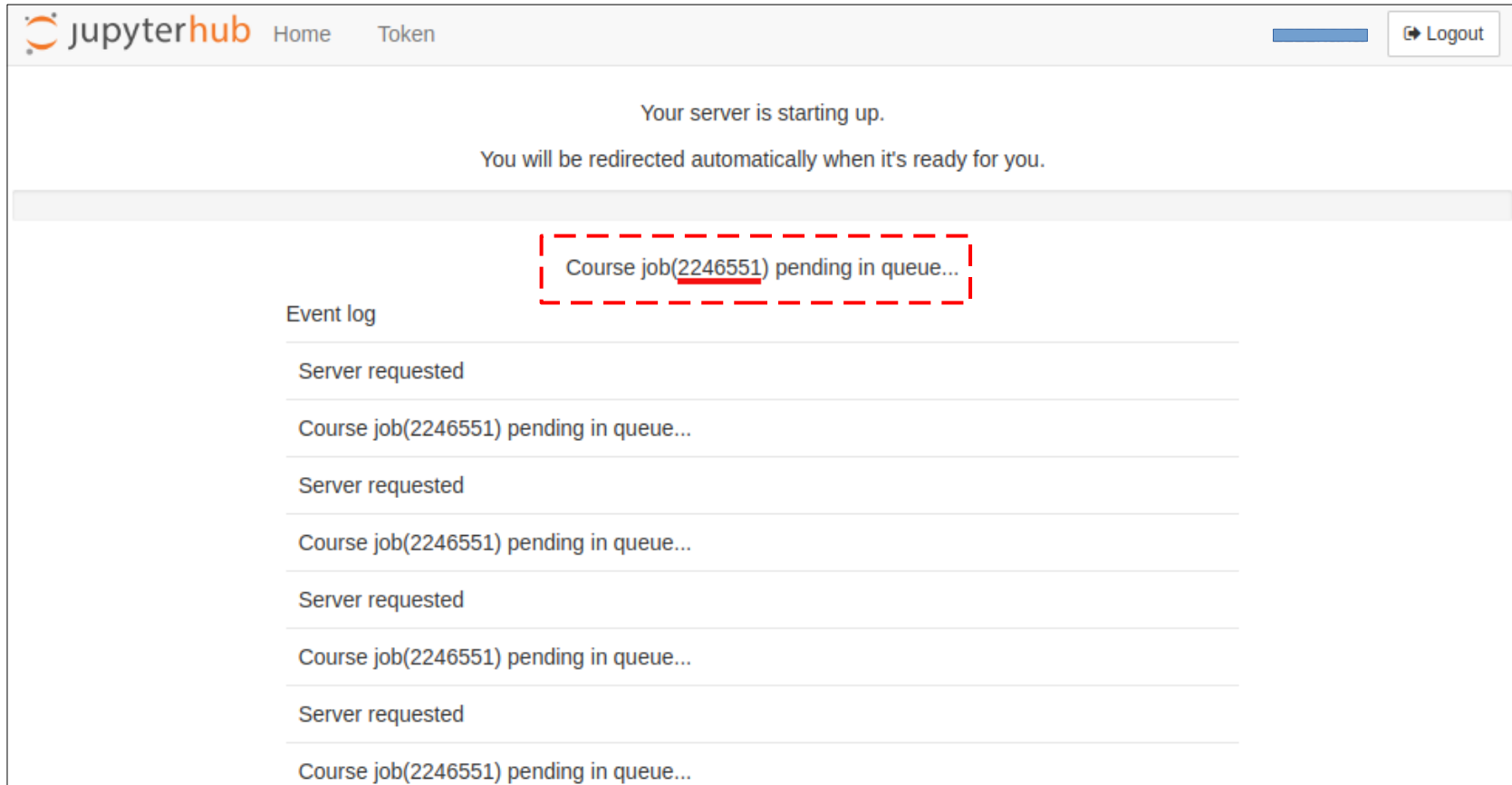
```

Export course config
Import course config

Running Course Jobs

Course name	SLURM JobID	Time left	Last activity	Actions
Python for scientific computing (Course ID: course111)	2262392	2:28:03	2 hours ago	connect stop

JupyterHub@LUH-Cluster: Kursjob in der SLURM-Warteschlange



The screenshot shows the JupyterHub web interface. At the top, there is a navigation bar with the JupyterHub logo, 'Home', 'Token', and a 'Logout' button. Below the navigation bar, a message states: 'Your server is starting up. You will be redirected automatically when it's ready for you.' In the center of the page, a red dashed box highlights the text 'Course job(2246551) pending in queue...'. Below this, an 'Event log' section displays a list of events: 'Server requested' followed by 'Course job(2246551) pending in queue...' in a repeating pattern.

- Die Wartezeit hängt von den Kursjobanforderungen und der aktuellen Cluster-Auslastung ab
- Um die Wartezeit zu verkürzen, können auf Anfrage einige Cluster-Rechenressourcen vorübergehend für den Kurs reserviert werden

JupyterHub@LUH-Cluster

NbGrader für Kursleiter: Aufgaben verwalten

← → ↻ 🔒 jupyterhub.cluster.uni-hannover.de/user/zzzznana/courseB3/formgrader/manage_assignments# 🔍 ☆ 👤 ⋮

nbgrader

- Manage Assignments
- Manual Grading
- Manage Students

Manage Assignments. Course ID: courseB3

Assignments

Instructions (click to expand)

Search:

Name	Due Date	Status	Edit	Generate	Preview	Release	Collect	# Submissions	Generate Feedback	Release Feedback
ps1	2022-07-07 17:00:00 UTC	released						1		
ps2	2022-07-08 17:00:00 UTC	draft						0		

+ Add new assignment...

JupyterHub@LUH-Cluster: Homepage des Students

jupyterhub
Home
Token
Logout

While using this JupyterHub platform, you agree to have read and accepted the [usage notes](#)

Available Courses

Python for Scientific Computing (Course ID: courseB3)

Start

Job Options of Selected Course

Number of hours

08:00:00

Number of nodes

1

Number of CPU cores

4

Amount of memory per CPU core

2gb

Cluster partition

amo

Instructors

Course date

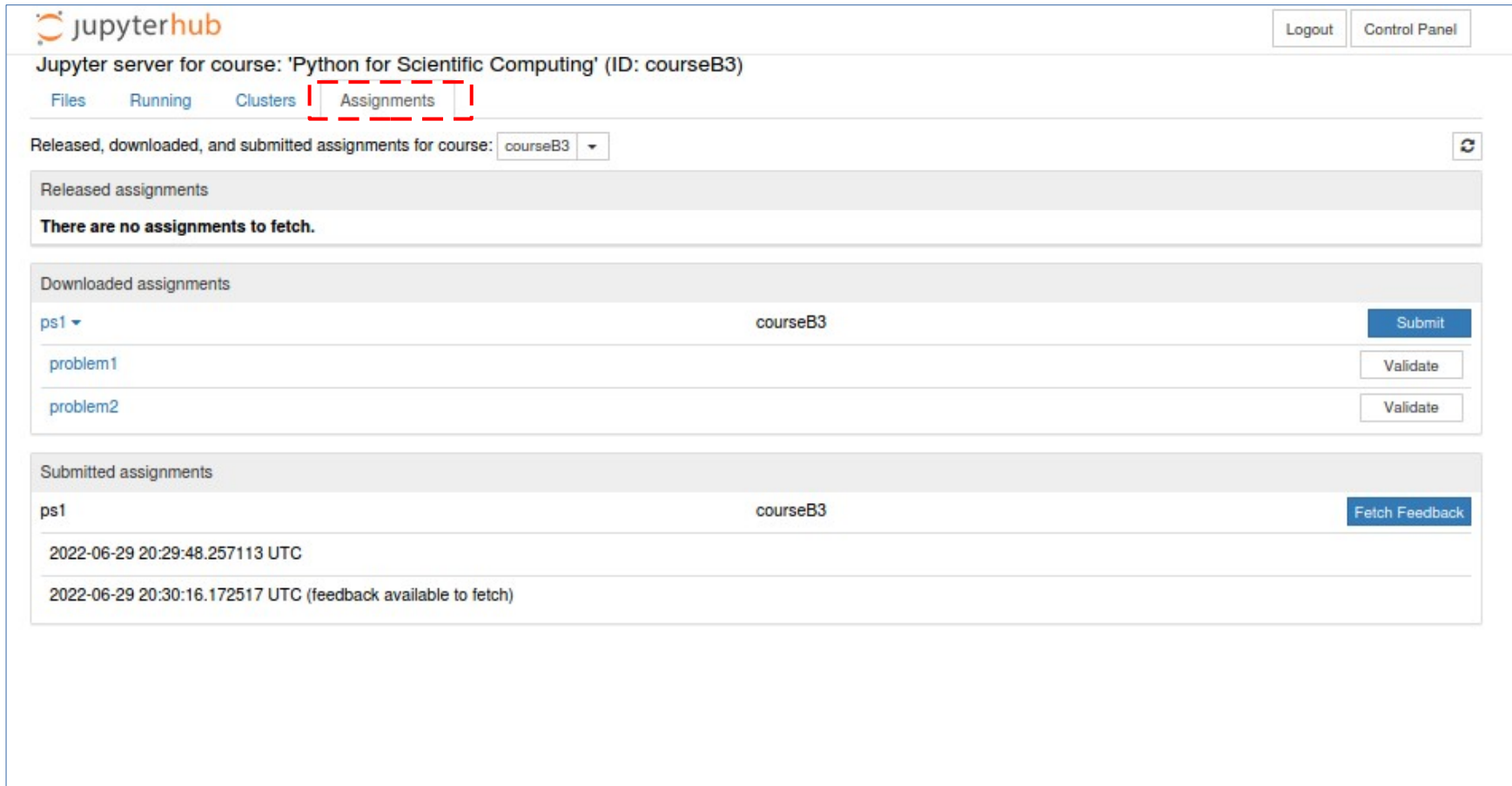
02.07.2022 - 05.07.2022

Running Course Jobs

Course name	SLURM JobID	Time left	Last activity	Actions
Python for Scientific Computing (Course ID: courseB3)	442504	1-00:00:00	30 minutes ago	connect stop

JupyterHub@LUH-Cluster

NbGrader für Studenten: Arbeiten an Aufgaben



jupyterhub

Logout Control Panel

Jupyter server for course: 'Python for Scientific Computing' (ID: courseB3)

Files Running Clusters **Assignments**

Released, downloaded, and submitted assignments for course: courseB3

Released assignments

There are no assignments to fetch.

Downloaded assignments

ps1 ▾	courseB3	Submit
problem1		Validate
problem2		Validate

Submitted assignments

ps1	courseB3	Fetch Feedback
2022-06-29 20:29:48.257113 UTC		
2022-06-29 20:30:16.172517 UTC (feedback available to fetch)		

JupyterHub@LUH-Cluster

Aktueller Status

- Seit Oktober 2023 im Produktionsbetrieb
- In 8 Kurse sind rund 600 Studenten eingeschrieben

Weitere Entwicklung

- NbGrader aktualisieren um **JupyterLab** zu unterstützen
- Weitere Funktionen auf der Kursleiterseite bereitstellen

JupyterHub@LUH-Cluster: Ausführliche Nutzungsanweisung im Wiki

docs.cluster.uni-hannover.de/doku.php

Leibniz Universität IT Services

Log In

Search

Sidebar Toggle

Trace: • start

Go to main page

Support

- Getting an account
- Connecting to cluster
- Running jobs
- Getting help
- Cluster introductory course

Links

- Scientific Computing at LUIS
- BIAS - manage usernames

LUIS HPC Cluster Documentation

This document is meant to facilitate your work with the cluster system of Leibniz University Hannover. Please take some time to read through this document and do not hesitate to contact the [cluster team](#), if you have questions. Please make sure you are subscribed to the Cluster-News mailing list in order to receive announcements concerning the cluster system.

In order to use the system documented here, you will first need an account. Accounts are created within "projects". Quite frequently, your institute will already have a project, and if that's the case, they can easily create an account for you. Ask for the key word "BIAS".

User's guide

Export to PDF

- About the LUIS compute systems
- How to connect to the cluster
- File systems
 - Handling large datasets within the cluster
- Transferring data to/from the cluster
 - Managing files in cloud storage using Rclone
 - Migrating files into the archive
- Submitting SLURM jobs
- Modules & Application software
 - Compiling software yourself using EasyBuild
 - Singularity containers
 - Conda usage
- Remote visualization for interactive 3D work
- When your work is done

Cluster resources and services

- Computing hardware
- Available software
- Cluster web portal
 - Remote visualization for interactive 3D work
 - Jupyter/Lab in the cluster
 - JupyterHub for teaching in the cluster**
- System status

Help and Support

- Frequently Asked Questions (FAQ)
- How to get support