



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 145 • Juni/Juli 2006

„Big Blue Gene Week“ auf JUBL: Nachlese

Die Förderung des Capability Computing, also von Anwendungen, die zur Problemlösung die volle Leistung eines Supercomputers benötigen, ist eine zentrale Aufgabe des ZAM/NIC. Derzeit werden solche Anwendungen im Wesentlichen auf dem Blue Gene/L-System JUBL gerechnet, typischerweise auf einer Partition mit 2048 Prozessoren. Um hier die Grenzen der Skalierbarkeit auszuloten und Erfahrungen mit der Nutzung größerer Partitionen zu sammeln, hat das ZAM/NIC vom 22. bis zum 28. Mai 2006 eine „Big Blue Gene Week“ durchgeführt, in der auf JUBL ausschließlich Anwendungen gerechnet und getestet wurden, die zwischen 4096 und 16384 Prozessoren, also 2 bis 8 Racks (komplette Maschine) benötigten.

Die Anmeldungen für diese Woche waren so zahlreich, dass keine ungenutzten Lücken übrig blieben. Die Hälfte der Zeit wurde für Rechnungen mit maximaler Prozessoranzahl genutzt, die restliche Zeit verteilte sich in etwa gleich auf 4-Rack- und 2-Rack-Partitionen. Die Ergebnisse der verschiedenen Läufe waren sehr positiv. So konnte die extrem gute Skalierbarkeit von drei Programmen aus der Festkörperforschung und verschiedener QCD-Codes auf größeren Partitionen bestätigt werden. Ein QCD-Programm (volle QCD auf einem $48^3 \times 96$ Gitter) erreichte mit angepassten Assembler-Routinen auf der gesamten Maschine eine Leistung von 7,5 TFlops, 16 % der Peak-Performance. Im Bereich Quanten-Computing konnte mit der vollständig implementierten Simulation des Algorithmus von Shor auf einem 37-Qubit-System die bislang größte Quanten-Computer-Simulation durchgeführt werden (3 TByte Hauptspeicher und 16384 Prozessoren). Nachdem die Strukturoptimierung eines kubisch raumzentrierten Fe-Nanoclusters mit 641 Atomen mit dem DFT-Paket VASP bereits erfolgreich auf einem Rack abgeschlossen werden konnte, haben Tests ergeben, dass durch den Einsatz von zwei Racks auch die elektronischen Eigenschaften eines Nanopartikels mit 775 Fe-Atomen berechnet werden können. Während der Woche

wurde auch die automatische, parallele Leistungsanalyse von realen Anwendungen getestet. Die Maschine bewältigte dabei auch das Speichern und Laden großer Ereignisspuren (0,25 TByte).

Eine erfreuliche Nachricht erreichte uns aus dem Institut für Festkörperforschung (IFF) des Forschungszentrums Jülich zum Programmpaket CPMD: Dr. Robert Jones berichtete, dass eine Erhöhung des Cutoffs und damit eine Erhöhung der Anzahl der Basisfunktionen in CPMD auf JUBL mit einer geringeren Erhöhung der Rechenzeit einhergeht als auf JUMP oder anderen Systemen. Es wurde gemessen, dass eine Erhöhung der Basisfunktionen um den Faktor 20 nur zu einer Verdreifachung der Rechenzeit führt.

Auch wenn während der Woche zwei Hardware-Fehler auftraten, die die Rechnungen vorübergehend behinderten, lässt sich insgesamt festhalten, dass Multi-Rack-Anwendungen im Produktionsbetrieb durchaus attraktiv für Benutzer sind. Das ZAM/NIC wird deshalb auch weiterhin Anwendungen dieser Größe nach Kräften fördern. (Ansprechpartner: Dr. Norbert Attig, Tel. 4416)

Neue Lizenz-Server

Der seit mehr als zehn Jahren vom ZAM betriebene Lizenz-Server für netzwerklicenzierte Software im FZJ wird in den nächsten Monaten auf ein neues System umgestellt. Das neue Lizenz-Server-System besteht aus drei Linux-Rechnern und bietet somit eine erhöhte Ausfallsicherheit.

Auf den vom ZAM betreuten Clients erfolgt die Umstellung des Zugriffs zentral. Auf allen nicht vom ZAM betreuten Rechnern sind die lokalen Systemadministratoren für die Anpassung der Lizenzabfrage der lizenzierten Software verantwortlich.

Folgende Produkte sind von der Umstellung betroffen: die FEM-Pakete ANSYS und FEMLAB/COMSOL Multiphysics, die interaktiven Softwaresysteme Maple, Mathematica und MATLAB, die Fortran-Bibliothek IMSL, die Visualisierungs-

pakete IDL und AVS, Fortran- und C/C++-Compiler von NAG, PGI und Intel sowie die Debugger TotalView und DDT. Weitere Informationen und einen Zeitplan für die produktweise Umstellung finden Sie unter http://www.fz-juelich.de/zam/service/licence_de. (Ansprechpartner: Maik Boltes, Tel. 6557, und Dr. Bernd Körfgen, Tel. 6761)

Mobiles Internet-Café

Das ZAM verfügt über ein „mobiles Internet-Café“, um Teilnehmern von Veranstaltungen des FZJ einen Internet-Zugang zu ermöglichen. Auf Basis von Sun Ray ThinClients können derzeit acht Linux-Arbeitsplätze installiert und betrieben werden. Falls Sie für Ihre Veranstaltung dieses Angebot nutzen möchten, richten Sie Ihre Anfragen bitte an Thomas Plaga (E-Mail: th.plaga@fz-juelich.de, Tel. 2101).

Dr. Wesner: Neuer Datenschutz- und IT-Sicherheitsbeauftragter

Der Vorstand hat Herrn Dr. Dave Alan Wesner mit Wirkung vom 1. Mai 2006 zum neuen Datenschutzbeauftragten (DSB) des Forschungszentrums ernannt. Er löst damit Herrn Dr. Eickermann ab, der diese Funktion seit dem Ausscheiden von Herrn Tavernier kommissarisch wahrgenommen hat. Als DSB berät Herr Wesner den Vorstand und die Mitarbeiter des Forschungszentrums in allen datenschutzrechtlichen Fragen. Zu seinen durch das Bundesdatenschutzgesetz geregelten Aufgaben gehören auch die Mitwirkung bei der Einführung neuer IT-Anwendungen zur Verarbeitung personenbezogener Daten und die Überwachung ihrer rechtskonformen Anwendung.

Im Zuge dieser Neubesetzung hat Herr Wesner auch die Funktion des IT-Sicherheitsbeauftragten des Forschungszentrums von Herrn Eickermann übernommen. Er ist damit für die übergeordnete Planung und Koordinierung aller IT-sicherheitspezifischen Aufgaben im Forschungszentrum zuständig. Dabei wird er durch das IT-Sicherheitsmanagement-Team, das ZAM und nicht zuletzt durch die Ansprechpartner für IT-Sicherheit in den Instituten unterstützt. Herr Wesner ist unter der bekannten Telefonnummer 5520 des DSB telefonisch erreichbar und hat seinen Arbeitsplatz weiterhin im ZAM.

„ZAM aktuell“ wünscht Herrn Wesner viel Erfolg für diese verantwortungsvollen Aufgaben.

Neufestlegung der Rechenzeitkosten

Im Zuge des JUBL-Produktionsstarts wurde eine Neufestlegung der Rechenzeitkosten für alle Systeme zum 1. Juli 2006 notwendig. Die neuen Preise und Abrechnungsformeln sind in der Technischen Kurzinformation TKI-0015 detailliert beschrieben. (Ansprechpartnerin: Stefanie Meier, Tel. 4494)

Neue ZAM-Dokumentation

- TKI-0015 Abrechnungs- und Kontingentierungsverfahren für die zentralen Rechnersysteme und Dienste
- IB-2006-04 HyParSVM – A New Hybrid Parallel Software for Support Vector Machine Learning
- IB-2006-05 Eine Studie zur kostensensitiven Klassifikation unausgeglichener Datensätze mit Support-Vektor-Maschinen
- IB-2006-06 Gütemaße zur Optimierung von Support-Vektor-Maschinen
- IB-2006-07 Eine Einführung zu String-Kernen für die Sequenzanalyse mit Support-Vektor-Maschinen und anderen Kern-basierten Lernalgorithmen
- IB-2006-08 Leistungsmessungen bei der Volltextsuche mit Oracle Ultra Search im wissenschaftlichen Umfeld

Die ZAM-Benutzerdokumente sind im Informationszentrum erhältlich und stehen auf dem Web-Server zur Verfügung unter <http://www.fz-juelich.de/zam/docs/>.

ZAM/NIC-Veranstaltungen

The Impact of Multicore on Math Software and Exploiting Single Precision Computing to Obtain Double Precision Results

Referent: Prof. Dr. Jack Dongarra, University of Tennessee
Termin: Freitag, 23.6.2006, 15.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Simulations of Membrane Proteins

Referent: Priv.-Doz. Dr. Artur Baumgärtner, IFF
Termin: Dienstag, 27.6.2006, 13.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Erstellung wissenschaftlicher Texte mit LaTeX

Referenten: Stephan Graf, Oliver Bucker, ZAM
Termin: 10. - 12.7.2006, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an text.zam@fz-juelich.de, Tel. 6578

Einführung in die Programmierung und Nutzung der Supercomputersysteme JUMP und JUBL

Referenten: IBM-Mitarbeiter, ZAM-Mitarbeiter
Termin: 10. - 11.8.2006
Ort: Hörsaal im ZAM
Anmeldung: B.Scheid@fz-juelich.de, Tel. (0 24 61) 61 64 02

Weitere Veranstaltungshinweise:

ZAM: <http://www.fz-juelich.de/zam/neues/termine/>
NIC: <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/>

Redaktion: Dr. Sabine Höfler-Thierfeldt, Tel. 6765