



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 136 • Juli/August 2005

IBM Blue Gene/L installiert

Als weiterer leistungsstarker Rechner wurde kürzlich im ZAM ein System IBM Blue Gene/L, JUBL (Jülicher Blue Gene/L), installiert. IBM Blue Gene besitzt eine innovative Architektur und wird derzeit weltweit bei namhaften Institutionen (z.B. Lawrence Livermore National Laboratory, Argonne National Laboratory, Edinburgh Parallel Computing Centre, EPF Lausanne) für ausgewählte Anwendungen im High-Performance-Computing eingesetzt. Von der Leistungsfähigkeit dieser Architektur profitieren insbesondere hochskalierende parallele Anwendungen.

Der Einsatz des Rechners in Jülich hat zum Ziel, die Architektur eines zukünftigen Leadership-Class-Systems zu untersuchen und potentielle Nutzer an ein solches System heranzuführen. Dazu werden aus unterschiedlichen Wissenschaftsgebieten geeignete Anwendungen ausgewählt und im Hinblick auf Portierbarkeit und Effizienz analysiert. Der Rechner besteht aus 1024 Rechenknoten, die jeweils zwei Prozessoren des Typs IBM PowerPC 440 enthalten (700 MHz, 2,8 GFlops). Insgesamt verfügt das System über 512 GB Hauptspeicher. Die Spitzenleistung liegt bei 5,6 TFlops; für den LINPACK-Benchmark wurden 4,7 TFlops gemessen. Damit wird das System zurzeit auf Platz 60 der TOP500-Liste geführt.

Je nach Anwendung können die Knoten in zwei verschiedenen Modi betrieben werden: einmal im Coprozessor-Mode, in dem eine CPU ausschließlich für die MPI-Kommunikation verwendet wird, und zum anderen im Virtual-Node-Mode, in dem auf beiden Prozessoren unabhängige MPI-Tasks ausgeführt werden. Zusätzlich zu den Rechenknoten ist das System mit 64 I/O-Knoten mit je einem externen 1-GB/s-Ethernet-Anschluss ausgestattet. Das System arbeitet mit fünf verschiedenen Verbindungsnetzwerken. Für die Anwendungen wichtig ist das 3D-Torus-Netzwerk, und für kollektive Operation wird eine Tree-Topologie genutzt. Das Verbindungsnetzwerk hat eine maximale Latenzzeit von 6,4 μ s und eine aggregierte Bandbreite von 2,1 GByte/s pro

Knoten. Auf den Rechenknoten läuft jeweils ein reduzierter Linux-Kernel und auf den I/O-Knoten ein vollständiges Linux-Betriebssystem. Für den Betrieb, den Benutzerzugriff und die Programmierumgebung sind vorläufig zwei kleinere IBM-Systeme mit SuSE-Linux als Vorrechner installiert.

Über die I/O-Knoten des Rechners Blue Gene/L wird der Zugriff auf ein externes 2 TByte großes Filesystem für Benutzerdaten und Applikationen realisiert. Es ist geplant, in Zukunft auch die HOME-Filesysteme im GPFS des JUMP einzubinden, so dass die Nutzer ein gemeinsames Dateisystem vorfinden. Über diesen Verbund kann dann auch das vorhandene Roboter-Bandarchiv genutzt werden. Insgesamt steht damit ein Rechnerkomplex von 14,5 TFlops in Jülich zur Verfügung. Weitere Informationen finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/ibm-bgl>. Ansprechpartner für ausgewählte Anwendungen ist Dr. Norbert Attig, Tel. 4416.

Neue NIC-Forschungsgruppe

Seit dem 1. Juli hat das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) eine neue Forschungsgruppe, „Computer-gestützte Biologie und Biophysik“, die von Prof. Dr. Ulrich Hansmann (Michigan Technological University) geleitet wird. Die neue Forschungsgruppe tritt an die Stelle der bisherigen Gruppe „Komplexe Systeme“ von Prof. Dr. Grassberger, der in Ruhestand ging. Mit der Hilfe von Simulationen auf Supercomputern wie JUMP, IBM Blue Gene/L oder Cray XD1 erforscht Dr. Hansmanns Forschungsgruppe die Physik von Proteinen, den „Arbeitspferden“ der Zellen.

Proteine transportieren Moleküle, steuern chemische Prozesse und bekämpfen Infektionen. Diese vielfältigen Funktionen hängen von der exakten Gestalt eines Proteins ab. Die neue Forschungsgruppe untersucht den Prozess, bei dem sich ein Protein in diese spezifische Struktur faltet. Diese Fragestellung ist von besonderem Interesse, da fehlgefaltete Proteine die Ursache für Krankheiten wie Alzheimer und BSE sind. Eine Entschlüsselung des Zusammen-

hangs zwischen der chemischen Zusammensetzung von Proteinen (die im genetischen Code festgelegt ist) und ihrer Struktur und Funktion erlaubt auch die zielgerechte Entwicklung neuartiger Medikamente, die weniger Nebenwirkungen haben und spezifischer wirken. Die Nutzung von Proteinen zur Entwicklung von „Nanomaschinen“ ist ein weiteres Forschungsgebiet der neuen Gruppe. Informationen zur neuen Forschungsgruppe finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/nic/cbb>. (Ansprechpartner: Prof. Dr. Ulrich Hansmann, Tel. 1526).

UNICORE-SSH

Seit dem 1. Juli 2004 wird UNICORE auf JUMP als bevorzugte Zugangssoftware eingesetzt. UNICORE erlaubt eine einheitliche und sichere Nutzung verteilter Ressourcen (Rechner, Daten, Anwendungen) im Grid. Auf Wunsch der Community hat das ZAM einen SSH-Zugang mit UNICORE realisiert, der Benutzern Interaktivität bei der Jobvorbereitung und -ausführung zur Verfügung stellt. UNICORE-SSH erlaubt durch seinen Single-Sign-On-Mechanismus die Öffnung von SSH-Verbindungen zu unterschiedlichen Maschinen ohne zusätzliche Passworteingaben.

Damit bietet UNICORE neben dem Batch-Zugang auch eine interaktive Arbeitsumgebung. Weitere Informationen zu UNICORE und die benötigte Software für Windows und Unix finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/unicore>. Auf den vom ZAM betreuten Workstation-Gruppen ist der UNICORE-Client in der jeweils aktuellen Version bereits vorinstalliert. (Ansprechpartner: Michael Rambadt, Tel. 4340)

Erstes DEISA-Review

Am 16. Juni 2005 fand in Paris das erste Review des von der EU geförderten Projekts DEISA (Distributed European Infrastructure for Scientific Applications) statt. DEISA hat zum Ziel, eine verteilte, europäische Supercomputerumgebung zu realisieren, und trägt damit zur Schaffung einer europäischen Wissenschaftsinfrastruktur bei. Anhand ausgewählter Anwendungen wurde den internationalen Gutachtern die im ersten Projektjahr verwirklichte DEISA-Infrastruktur demonstriert. Dazu gehörten insbesondere die unter Federführung des ZAM realisierten Hochgeschwindigkeitsverbindungen zwischen den Partnern, der Zugang zu den DEISA-Systemen über UNICORE sowie der Zugriff auf verteilte Daten mittels GPFS. Die Gutachter bewerteten die erzielten Ergebnisse sehr positiv. Sie regten an, die Arbeiten offensiv in den Anwender-Communities vorzustellen und die Zusammenarbeit mit andern Projekten, z.B. dem amerikanischen TeraGRID-Projekt, zu verstärken.

Im nächsten Projekt-Review sollen die wissenschaftlichen Ergebnisse der DEISA Extreme Computing Initiative darge-

stellt werden. Über 50 Anträge mit insgesamt 32 Millionen Stunden Rechenzeit verdeutlichen den Bedarf an Supercomputerleistung in Europa. Weitere Informationen finden sich unter <http://www.deisa.org>. (Ansprechpartner: Dietmar Erwin, Tel. 6412)

Kurs „Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“

Vom 9. bis 12. August 2005 findet ein Einführungskurs zum Thema „Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ statt. Der Kurs richtet sich in erster Linie an die Teilnehmer des NIC/ZAM-Gaststudentenprogramms. Es sind jedoch noch einige Plätze für andere Interessenten frei. Anmeldungen nimmt Dr. Boris Orth, Tel. 2528, entgegen.

Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2005-02 Entwicklung einer Online-Visualisierung zu dem Simulationsprogramm NBODY6++ mit Hilfe der Kopplungsbibliothek VISIT
- IB-2005-04 Schnelle Wavelet basierte Berechnung von langreichweitigen Wechselwirkungen in Vielteilchensystemen
- IB-2005-06 Divergence-Free Description of Molecular Rotation in Cartesian Coordinates: Derivation of the Axis-Rotation Formula and Application to Molecular Modelling
- IB-2005-07 Analysis of Support Vector Machine Training Costs for Large and Unbalanced Data from Pharmaceutical Industry

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

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP für NIC/ZAM-Gaststudenten

Referenten: Dr. Bernd Mohr, Dr. Boris Orth, ZAM

Termin: 9. - 12.8.2005, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an B.Orth@fz-juelich.de, Tel. 2528

Wenn Sie regelmäßig per E-Mail über unsere Veranstaltungen informiert werden möchten, schicken Sie eine E-Mail an majordomo@fz-juelich.de mit dem Inhalt: `subscribe kurse_zam`.

Weitere Veranstaltungshinweise:

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

NIC: <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/>